



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD AZCAPOTZALCO

---

POSGRADO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

CONTROL ROBUSTO DE  
REACTORES CONTINUOS DE  
TANQUE AGITADO PARA LA  
PRODUCCIÓN DE  
BIOHIDRÓGENO

T E S I S  
PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRA EN INGENIERÍA DE PROCESOS

P R E S E N T A:  
MARIANA RODRÍGUEZ JARA

DIRECTOR DE TESIS:  
Dr. HÉCTOR F. PUEBLA NÚÑEZ

CODIRECTOR DE TESIS:  
M. en I. HUMBERTO EDUARDO GONZÁLEZ  
BRAVO

NOVIEMBRE 2018

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>14</b>
1.1. Motivación . . . . .	14
1.2. Estado del arte . . . . .	17
1.2.1. Producción de hidrógeno . . . . .	17
1.2.2. Control de la producción de hidrógeno. . . . .	18
1.2.3. Diseño de controladores robustos en bioprocesos. . . . .	18
1.3. Hipótesis y objetivos . . . . .	19
1.3.1. Hipótesis . . . . .	19
1.3.2. Objetivo general . . . . .	19
1.3.3. Objetivos específicos . . . . .	19
1.4. Organización de la tesis . . . . .	20
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>21</b>
2.1. Reactores Biológicos . . . . .	21
2.1.1. Biología celular . . . . .	21
2.1.2. Procesos aerobios y anaerobios . . . . .	22
2.1.3. Efecto de parámetros en procesos biológicos . . . . .	25
2.1.4. Reactores aerobios . . . . .	26
2.1.5. Reactores anaerobios . . . . .	31
2.1.6. Modo de operación . . . . .	35
2.2. Producción de hidrógeno por Métodos Convencionales . . . . .	37
2.2.1. Electrólisis . . . . .	37
2.2.2. Reformado de vapor . . . . .	38

2.3.	Producción de hidrógeno por Métodos Biológicos . . . . .	38
2.3.1.	Biofotólisis indirecta . . . . .	39
2.3.2.	Fermentación oscura . . . . .	39
2.3.3.	Foto-fermentación . . . . .	41
2.4.	Modelado de Procesos . . . . .	42
2.4.1.	Balances de materia y energía . . . . .	43
2.4.2.	Modelado de bioprocesos . . . . .	44
2.4.3.	Modelado de reacciones biológicas . . . . .	44
2.5.	Análisis Matemático y Numérico . . . . .	47
2.5.1.	Puntos de equilibrio . . . . .	47
2.5.2.	Estabilidad de los puntos de equilibrio . . . . .	48
2.5.3.	Linealización . . . . .	49
2.5.4.	Función de transferencia . . . . .	50
2.5.5.	Simulación numérica . . . . .	51
2.6.	Optimización de Procesos . . . . .	52
2.6.1.	Problema de optimización . . . . .	52
2.6.2.	Métodos de optimización . . . . .	53
2.7.	Control de Procesos . . . . .	55
2.7.1.	Definiciones . . . . .	56
2.7.2.	Identificación empírica . . . . .	58
2.7.3.	Control clásico PID . . . . .	59
2.7.4.	Control moderno . . . . .	62
2.8.	Incertidumbre y robustez . . . . .	64
2.8.1.	Incertidumbre . . . . .	64
2.8.2.	Robustez . . . . .	64
2.9.	Control robusto por compensación de error de modelado . . . . .	64
<b>3.</b>	<b>Casos de Estudio</b>	<b>68</b>
3.1.	Fotofermentación anaerobia de hidrógeno en un CSTR . . . . .	68
3.1.1.	Descripción del proceso . . . . .	68
3.1.2.	Fotofermentación en un CSTR . . . . .	69

3.1.3.	Modelo Matemático . . . . .	69
3.1.4.	Simulaciones Numéricas . . . . .	71
3.1.5.	Análisis Matemático . . . . .	72
3.2.	Fermentación Oscura de Hidrógeno en un CSTR . . . . .	74
3.2.1.	Descripción . . . . .	74
3.2.2.	Modelo Matemático . . . . .	75
3.2.3.	Simulación Numérica . . . . .	78
3.2.4.	Análisis Matemático . . . . .	81
<b>4.</b>	<b>Optimización de la Producción de Hidrógeno</b>	<b>83</b>
4.1.	Foto-fermentación . . . . .	83
4.1.1.	Función objetivo . . . . .	83
4.1.2.	Restricciones . . . . .	84
4.1.3.	Resultados . . . . .	84
4.2.	Fermentación Oscura . . . . .	85
4.2.1.	Funciones objetivos . . . . .	85
4.2.2.	Restricciones . . . . .	85
4.2.3.	Resultados . . . . .	87
<b>5.</b>	<b>Control de la Producción de Hidrógeno</b>	<b>88</b>
5.1.	Fotofermentación . . . . .	88
5.1.1.	Planteamiento del problema . . . . .	88
5.1.2.	Identificación Empírica . . . . .	89
5.1.3.	Diseño del controlador . . . . .	90
5.1.4.	Diseño de control con base al modelo no-lineal del proceso . . . . .	91
5.1.5.	Diseño de control con base a un modelo lineal del proceso . . . . .	92
5.1.6.	Simulación a lazo cerrado . . . . .	93
5.2.	Fermentación oscura . . . . .	94
5.2.1.	Planteamiento del problema . . . . .	94
5.2.2.	Identificación Empírica . . . . .	95
5.2.3.	Diseño del controlador . . . . .	97

5.2.4. Simulación a lazo cerrado . . . . .	99
<b>6. Conclusiones</b>	<b>102</b>
6.1. Resumen de la tesis . . . . .	102
6.2. Resultados principales . . . . .	102
6.3. Trabajo complementario . . . . .	103
<b>Bibliografía</b>	<b>104</b>
<b>A. Material Complementario</b>	<b>110</b>
A.1. Programas para la simulación numérica sin control de los casos de estudio . . . . .	110
A.2. Sintonizado de los controladores PI con IMC . . . . .	113
A.3. Trabajos derivados de la tesis . . . . .	114

# Índice de figuras

2-1. Vía de degradación aeróbica. . . . .	23
2-2. Reactor biológico (anaerobio) de discos rotatarios. . . . .	27
2-3. Sistema de lodos activados (ASS). . . . .	27
2-4. Reactor biológico (anaerobio) por elevación de aire. . . . .	28
2-5. Reactor aerobio de lecho fijo. . . . .	29
2-6. Reactor aerobio de columna de burbujeo. . . . .	30
2-7. Reactor aerobio de lecho fluidizado inverso. . . . .	31
2-8. Reactor aerobio de película. . . . .	32
2-9. Flujo ascendente de lecho de lodos (UASB). . . . .	33
2-10. Reactor biológico de lecho fluidizado de flujo inverso. . . . .	34
2-11. Comparación de la producción de hidrógeno y algas. . . . .	43
2-12. Diferentes tipos de complejidad en modelos de Bioprocesos. . . . .	45
2-13. Esquema de control con retroalimentación y perturbaciones. . . . .	56
3-1. Foto-fermentador continuo para producción de $H_2$ . . . . .	69
3-2. Efecto de cambios en el sustrato de entrada. . . . .	71
3-3. Efecto de diferentes condiciones iniciales en la simulación base. . . . .	72
3-4. Ruta metabólica del proceso de fermentación oscura. . . . .	75
3-5. Reactor continuo de tanque agitado para fermentación oscura de hidrógeno. . . . .	76
3-6. Comportamiento dinámico de la glucosa, acetato y propionato en un CSTR de fermentación oscura. . . . .	78
3-7. Comportamiento dinámico del butirato, etanol y biomasa en un CSTR de fermentación oscura. . . . .	79

3-8. Comportamiento dinámico del flujo de hidrógeno para el valor nominal de flujo volumétrico $Q = 3$ L/d en un CSTR de fermentación oscura. . . . .	79
3-9. Efecto de las condiciones iniciales en el modelo de fermentación oscura. . . . .	80
3-10. Efecto de la glucosa de entrada en la simulación numérica del modelo de fermentación oscura. . . . .	80
5-1. Configuración retroalimentada del problema de control de hidrógeno en el foto-fermentador. . . . .	89
5-2. Identificación empírica del foto-fermentador. . . . .	90
5-3. Desempeño del control basado en modelo no-lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico. . . . .	94
5-4. Producción de hidrógeno y entrada de control para el control basado en modelo no-lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico. . . . .	95
5-5. Desempeño del control basado en modelo lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico. . . . .	96
5-6. Producción de hidrógeno y entrada de control para el control basado en modelo lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico. . . . .	97
5-7. Problema de control del CSTR para fermentación oscura. . . . .	97
5-8. Identificación empírica del CSTR de producción de hidrógeno por fermentación oscura. . . . .	98
5-9. Comportamiento con control basado en modelo lineal para la Glucosa, Acetato, y Propianato en fermentación oscura. . . . .	100
5-10. Comportamiento con control basado en modelo lineal para el Butirato, Etanol, y Biomasa en fermentación oscura. . . . .	101
5-11. Control de $qH_2$ con control basado en modelo lineal y control PI para fermentación oscura en un CSTR. . . . .	101
A-1. Simulación numérica del caso de estudio 1: Subrutina principal. . . . .	110
A-2. Simulación numérica del caso de estudio 1: Parámetros. . . . .	111
A-3. Simulación numérica del caso de estudio 1: Modelo. . . . .	111
A-4. Simulación numérica del caso de estudio 2: Subrutina principal. . . . .	112
A-5. Simulación numérica del caso de estudio 2: Parámetros. . . . .	112

A-6. Simulación numérica del caso de estudio 2: Modelo. . . . .	113
---	-----



# Índice de cuadros

2.1. Parámetros del método de sintonizado de Ziegler-Nichols . . . . .	61
3.1. Puntos de equilibrio del modelo de foto-fermentación. . . . .	73
3.2. Valores propios de dos puntos de equilibrio del modelo de foto-fermentación. . . . .	73
4.1. Resultados de la optimización del modelo de foto-fermentación. . . . .	84
4.2. Resultados de la optimización del modelo de fermentación obscura. . . . .	87

# Lista de Acrónimos

AD.....	Digestión Anaerobia <sup>1</sup>
AnFB.....	Digestor de Lecho Fluidizado
ATP.....	Trifosfato de Adenosina
CSTR.....	Reactor Continuo de Tanque Agitado
DQO.....	Demanda Química de Oxígeno
IMC.....	Control de Modo Interno
NADH.....	Dinucleótido de Nicotinamida y Adenina
NADPH.....	Nicotinamida Adenina Dinucleótido Fosfato
MEC.....	Compensación de Error de Modelado
ODE.....	Ecuación Diferencial Ordinaria
PID.....	Proporcional-Integral-Derivativo
PFTR.....	Reactor Tubular de Flujo Pistón
PNSB.....	Bacterias Moradas no Azufradas
SBR.....	Reactor Secuencial Lote
SISO.....	Una Entrada Una Salida
UASB.....	Reactor Anaerobio de Flujo Ascendente Con Manto De Lodos
VFA.....	Ácidos Grasos Volátiles

---

<sup>1</sup>Debido a su aceptación universal los acrónimos se derivan de sus siglas en inglés.

# Resumen

Un tema relevante de hoy en día es el cambio climático, el cual se genera entre otras cosas por la gran cantidad de gases arrojados a la atmósfera, los cuales son precursores del efecto invernadero. Una fuente principal de estos gases de efecto invernadero son las emisiones de vehículos motorizados a través de la combustión de combustibles fósiles. Más aun, uno de los mayores desafíos de nuestro siglo es cubrir la demanda mundial de energía, debido al incremento de la población y al aumento del nivel de vida. Sumado a esto, las reservas de combustibles fósiles son cada vez menos accesibles a medida que se consumen las de fácil acceso, por lo que el precio de dicho combustible cada vez es más elevado. Con la finalidad de mitigar efectos ambientales y tener seguridad energética, se ha propuesto la producción del hidrógeno por medio de procesos biológicos. El hidrógeno es un combustible con alto contenido energético y durante su combustión solo se genera agua como producto resultante, lo que reduce en forma importante los efectos ambientales de los combustibles convencionales.

El hidrógeno se puede producir mediante diferentes métodos. Uno de los más prometedores es por métodos biológicos, el cual emplea biomasa como materia prima. Con la producción del hidrógeno a partir de un sustrato se pueden obtener diversos beneficios, principalmente la obtención de energía limpia y la gestión de desechos. Sin embargo algunas desventajas de la producción de hidrógeno a partir de biomasa son los bajos niveles de producción de hidrógeno así como la tasa de degradación del sustrato. En consecuencia los procesos continuos son preferibles para el aumento en la producción a largo plazo.

Se debe considerar que la operación convencional de procesos biotecnológicos continuos está sujeta a cambios importantes en la carga orgánica del sustrato, la actividad microbiana y las condiciones ambientales. Además, existe la necesidad de optimizar las condiciones para mejorar su productividad a largo plazo. Controlar un proceso biotecnológico puede ser un problema com-

plicado debido a dificultades inherentes tales como la cinética no lineal y las incertidumbres del modelo. En este trabajo, se presentan dos métodos biológicos de producción de hidrógeno, la fermentación oscura y la fotofermentación, a los cuales se les implementa su optimización para la producción de hidrógeno en un CSTR. Además, para garantizar el proceso en las condiciones óptimas, se propone un enfoque de control robusto y práctico. Los resultados muestran que es posible mejorar la operación convencional y la producción de hidrógeno en reactores continuos.

# Agradecimientos

- A Dios.
- A mis padres y hermanos.
- Al Dr. Héctor F. Puebla Núñez.
- Al M. en I. Humberto E. González Bravo.
- A los sinodales y jurados de tesis: Dr. Sergio A. Martínez Delgadillo, Dra. Alejandra Velasco Pérez, y Dr. Basilio del Muro Cuellar.
- Al CONACyT por la beca para estudios de maestría.
- Al CONACyT por la beca mixta para estancia de movilidad.
- Al Dr. Luis Ricardez Sandoval por permitirme colaborar con su grupo de trabajo en la Universidad de Waterloo, Canada.
- A la Universidad de Waterloo por las facilidades en la estancia de movilidad.
- A la UAM por el apoyo para una estancia de movilidad en la Universidad de Waterloo, Canada.
- A la UAM por el apoyo para la participación en el congreso SEEP 2018, en Glasgow, Escocia.

# Capítulo 1

## Introducción

En este Capítulo se presenta la motivación del tema de tesis, la producción de hidrógeno por métodos biológicos. Se identifica la problemática en esta clase de procesos y se establecen las hipótesis. Posteriormente, se definen los objetivos del trabajo de tesis. Finalmente, se presenta la estructura general del documento.

### 1.1. Motivación

En años recientes se ha generado una búsqueda de combustibles alternativos, debido a que se ha tenido un incremento considerable en los precios del petróleo y se ha hecho una reflexión sobre lo limitado de éste recurso. De acuerdo a la comunidad europea, los combustibles alternos incluyen los denominados biocombustibles, los cuales ofrecen muchos beneficios incluyendo la sustentabilidad, la reducción de gases de efecto de invernadero, el desarrollo rural y asegurar el abasto de combustibles (Demirbas, 2009).

Desde hace varios años, los biocombustibles que han generado mayor interés como substitutos potenciales de los combustibles derivados del petróleo son el bioetanol y el biodiesel (Demirbas, 2009). El biodiesel se puede producir a partir de aceites vegetales, grasas animales, aceites de rehúso, aceites de semillas de plantas silvestres y otros desperdicios con alto contenido graso (Demirbas, 2009). El bioetanol se produce por la fermentación de los azúcares contenidos en la materia orgánica de las plantas. El bioetanol mezclado con la gasolina produce un biocombustible de alto poder energético con características muy similares a la gasolina, pero con una importante reducción de las emisiones contaminantes en los motores tradicionales de combustión (Demirbas,

2009).

En años recientes, el hidrógeno se ha explorado como combustible en motores de combustión interna y en las celdas de combustibles para vehículos eléctricos (Dincer y Acar, 2015; Bedoya et al. 2008). El hidrógeno es un combustible simple, ligero y limpio, el cual se encuentra en estado gaseoso a la presión atmosférica y temperatura ambiente. El hidrógeno para uso como combustible no es puro, tiene cantidades pequeñas de oxígeno y otros materiales. Los métodos que generalmente se utilizan para producir hidrógeno son: la electrólisis y producción de gas de síntesis a través de reformación de vapor o la oxidación parcial (Dincer y Acar, 2015; Holladay et al. 2009).

La producción de hidrógeno a través de procesos biológicos, es una alternativa a otros procesos de producción de este biocombustible. El hidrógeno se produce comúnmente por algas, bacterias y arqueas (Dincer y Acar, 2015; Bedoya et al. 2008; Blanco Londoño y Rodríguez Chaparro, 2012). En las algas, el hidrógeno se produce a través de la enzima hidrogenasa, bajo condiciones de limitación de oxígeno. La producción de hidrógeno a partir de algas es muy baja y actualmente se está haciendo mucha investigación para mejorarla. El hidrógeno por bacterias se produce a través de la fermentación de ácidos orgánicos (e.g. ácidos acético, butírico y propanoico), los cuales se pueden obtener de aguas residuales o residuos agrícolas (Manish y Banerjee, 2008; Dincer y Acar, 2015; Bedoya et al. 2008;). Los métodos principales de fermentación de hidrógeno son: (i) la fermentación oscura, la cual no requiere el uso de luz, (ii) foto-fermentación, la cual sí requiere de luz como la fuente de energía, y (iii) la fermentación-combinada.

La producción de hidrógeno se pueden llevar a cabo en diferentes configuraciones de reactores biológicos, tales como operación lote, semi-lote y continua (Piemonte et al. 2014; Manish y Banerjee; 2008; López-Pérez et al. 2015; Boboescu et al. 2016). La operación lote o semi-lote se usa ampliamente en procesos biotecnológicos. Sus ventajas incluyen su simplicidad en equipamiento, flexibilidad de uso, y años de conocimiento. Los reactores continuos tienen como ventajas su mejor control de condiciones de operación, su bajo costo de operación y su aplicación para producción de grandes volúmenes. Con la finalidad de alcanzar altos niveles de producción, la fermentación de hidrógeno debe ser un proceso continuo. Los reactores continuos se deben operar en estado estacionario para alcanzar una conversión y producción deseada constante.

La operación convencional de un reactor continuo está sujeta a diversos problemas en su operación:

- Cambios en las condiciones de alimentación (variación de la materia prima o carga orgánica).
- Cambios en condiciones ambientales (temperatura principalmente) que afectan el desempeño de los microorganismos.
- Inhibición de la actividad de los microorganismos por variaciones operacionales (cambios de carga orgánica, cambios de pH por las reacciones biológicas).

Con la finalidad de garantizar la operación de los reactores continuos para producción de biohidrógeno es necesario el diseño e implementación de controladores. Para el diseño de controladores en bioprocesos es necesario considerar dos aspectos fundamentales (Puebla et al. 2013):

1. Robustez de los controladores. La robustez se refiere a la capacidad del controlador para tolerar condiciones o situaciones que no se consideraron durante su diseño. El diseño de un controlador se basa en un modelo que representa el proceso. Si el modelo no describe con precisión el proceso a controlar, el controlador puede tener un pobre desempeño en la práctica. Debido a que los modelos de cualquier proceso solo son representaciones aproximadas, y que además el modelado de procesos biológicos incluye muchas incertidumbres de los parámetros cinéticos y de transporte, es necesario que el diseño de controladores considere tales incertidumbres.
2. Información limitada de las variables del proceso. En procesos biológicos, la medición de la mayoría de las variables no está disponible en línea o forma instantánea.

Con base a lo anterior, se puede establecer lo siguiente:

- (i) El hidrógeno es un combustible alternativo que puede tener muchas aplicaciones.
- (ii) La producción de hidrógeno es comúnmente a través de la fermentación.
- (iii) La operación continua es deseable para incrementar su productividad.
- (iv) Para mejorar y garantizar la operación convencional de reactores biológico continuos de producción de hidrógeno se deben de introducir controladores.
- (v) Los controladores en reactores biológico continuos deben tener buenas propiedades de robustez.



En este trabajo se introducen controladores robustos para el control de reactores biológicos continuos para la producción de hidrógeno. El control robusto es esencial en bioprocesos debido a que permite considerar incertidumbre del modelo que representa el proceso. Para el diseño de controladores robustos se usarán dos técnicas de control: (i) El control por compensación de error de modelado (Puebla et al. 2013). (ii) El control de modo deslizante (Aguilar-López et al. 2010).

## 1.2. Estado del arte

En esta sección se proporciona una revisión del estado del arte de tres aspectos relacionados al trabajo a desarrollar: (i) La producción de hidrógeno. (ii) La aplicación de teoría de control en procesos de producción de hidrógeno. (iii) Diseño de control robusto en bioprocesos.

### 1.2.1. Producción de hidrógeno

En la literatura se han reportado diversos procesos de producción de hidrógeno. En particular, los siguientes trabajos presentan una revisión del estado del arte:

- Levin et al. (2004) compara la producción de hidrógeno por bio-fotólisis, foto-fermentación, y fermentación oscura. La comparación es en términos del tamaño del sistema que se necesita para alimentar celdas de combustible de varios tamaños.
- En Bedoeys et al. (2008) se describe los fundamentos básicos con énfasis en la fermentación oscura y el uso de diversos microorganismos y la manipulación de diferentes variables de proceso para obtener las condiciones que optimicen la producción de hidrógeno.
- Manish y Banerjee (2008) comparas cuatro procesos de producción de hidrógeno (fermentación oscura, foto-fermentación, procesos de dos etapas y electrólisis biocatalizada) que usan jugo de caña de azúcar como sustrato.
- Piemonte et al. (2014) formulan un modelo para describir la dinámica de un reactor lote secuencial para la producción de hidrógeno por fermentación anaerobia.
- Dincer y Acar (2015) presentan un estudio comparativo que evalúa factores ambientales, financieros y técnicos de varios métodos de producción de hidrogeno, incluyendo métodos foto-bioquímicos.

- Singh y Wahid (2015) revisan técnicas de pre-tratamiento, inmovilización celular, y fermentación para aumentar la producción de hidrógeno.
- Kumar et al. (2017) analizan la producción de hidrógeno usando fermentación oscura en términos de las características del substrato y su pretratamiento.

### 1.2.2. Control de la producción de hidrógeno.

Los trabajos de diseños de control en reactores biológicos para producción de hidrógeno son escasos. En particular, tres trabajos relacionados a la propuesta de tesis son los siguientes:

- López-Pérez et al. (2015) proponen un controlador con estructura no-lineal para incrementar la producción de hidrógeno en un reactor biológico continuo tipo tanque agitado.
- Zúñiga et al. (2015) estudian el problema de estimación de la concentración de substrato de la producción de hidrógeno por fermentación oscura en un reactor biológico continuo tipo tanque agitado.
- Velázquez-Sánchez et al. (2016) proponen un controlador no-lineal para incrementar la producción de hidrógeno en un reactor continuo usando una bacteria sulfato-reductora.

### 1.2.3. Diseño de controladores robustos en bioprocesos.

En la literatura se han propuesto dos controladores que presentan buenas propiedades para el control robusto de procesos químicos y biológicos: (i) el control robusto basado en estimación y compensación de incertidumbres (Puebla et al. 2013), y (ii) el control robusto basado en modo deslizante (Aguilar-López et al. 2010). Las ventajas de los controladores anteriores incluyen:

- (i) Diseño simple.
- (ii) Buenas propiedades de robustez.
- (iii) Buen desempeño.

Como se ha mencionado en los apartados anteriores, el hidrógeno es una tecnología que ha cobrado relevancia en los últimos años, debido a la ventaja que ofrece como un biocombustible simple y limpio. La producción de biocombustibles se debe hacer en forma continua y para mejorar su operación se deben de introducir controladores con buenas propiedades de robustez.

Algunas aplicaciones de los esquemas de control anteriores son los siguientes:

- Gonzalez et al. (2001) y Selişteanu et al. (2007) proponen esquemas de control de modo deslizante para modelos simples de un bioreactor.
- Marcos et al. (2004) presenta una combinación de control de modo deslizante y con estimación de incertidumbres para un modelo simple de un biorreactor.
- Méndez-Acosta et al. (2008) presentan el diseño de un control basado en MEC para el control de VFA en la digestión anaerobia.
- Neria-González et al. (2008) y Velasco-Perez et al. (2014) diseñan esquemas de control basados en MEC para sistemas de lodos activados.

## 1.3. Hipótesis y objetivos

### 1.3.1. Hipótesis

H1: Es posible mejorar la operación de biorreactores continuos para la producción de hidrógeno a través de la optimización del proceso y la implementación de controladores robustos.

H2: El control por técnicas de compensación de error de modelado proporciona buenas propiedades de robustez para la producción de hidrógeno en biorreactores continuos.

### 1.3.2. Objetivo general

Mejorar la operación convencional de reactores biológicos continuos de producción de hidrógeno a través de técnicas de optimización y control de procesos.

### 1.3.3. Objetivos específicos

- Estudiar la producción de hidrógeno a través de métodos biológicos.
- Analizar en forma matemática y numérica dos casos de estudio de la producción continua de hidrógeno:
  - Foto-fermentación.

- Fermentación oscura.
- Formular y resolver el problema de optimización en estado estacionario para los dos casos de estudio.
- Diseñar e implementar esquemas de control robusto para los dos casos de estudio.

## 1.4. Organización de la tesis

Este documento se organiza como sigue: En el Capítulo 2 se describen los conceptos y herramientas principales que sustentan este trabajo. En el Capítulo 3 se presentan los dos casos de estudio, incluyendo la descripción del modelo y su comportamiento para diferentes escenarios. En el Capítulo 4 se formulan y resuelven problemas de optimización en estado estacionario para los casos de estudio. En el Capítulo 5 se presenta el diseño del control robusto propuesto para los dos casos de estudio. Finalmente, en el Capítulo 6 se resumen las conclusiones principales del trabajo.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

En este Capítulo se presenta el soporte teórico de los conceptos y herramientas principales que se usan en este trabajo. Primero se presenta una revisión de conceptos de reactores biológicos y la producción de biocombustibles. Posteriormente, se introducen conceptos y herramientas de modelado y análisis matemático y numérico, optimización y control de procesos.

### 2.1. Reactores Biológicos

En años recientes, se ha incrementado el uso de microorganismos (bacterias, hongos, algas), así como de células humanas, vegetales o animales, para la producción de una gran gama de productos de interés comercial, tales como antibióticos, biocombustibles, alimentos y bebidas, etc. Además, su aplicación para el tratamiento de aguas residuales y contaminantes sólidos con alto contenido de materia orgánica ha demostrado ser atractiva desde el punto de vista ambiental.

#### 2.1.1. Biología celular

Las células, tejidos y organismos, tienen como base estructural miles de moléculas. Las cuales se pueden agrupar en ciertas categorías por sus semejanzas estructurales: azúcares, lípidos, y proteínas. Las proteínas realizan la mayoría de las funciones en un organismo viviente. Las proteínas están compuestas por carbono, oxígeno, hidrógeno, y nitrógeno (Bailey y Ollis, 1987).

Las proteínas son las piezas funcionales de la maquinaria celular. Por ejemplo, las proteínas son las que, en las membranas, se encargan de identificar y permitir el paso de sustancias hacia

uno y otro lado y son las que, como enzimas, se encargan de acelerar miles de reacciones químicas de las que depende la vida de la célula, así como de muchas otras funciones (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995).

El metabolismo celular se puede considerar como una serie de rutas de reacciones químicas, que se forman por una gran cantidad de moléculas que se transforman constantemente. Estas rutas reciben a las que llegan al organismo o a la célula del exterior, pero además tienen sus propias moléculas. Se pueden distinguir dos procesos. En uno de ellos, el anabolismo, a partir de moléculas pequeñas se obtienen otras más grandes; en el otro, el catabolismo a partir de moléculas grandes se obtienen otras más pequeñas. Una característica importante del proceso metabólico es que en el catabolismo de las moléculas pequeñas, como la glucosa, los ácidos grasos o los aminoácidos, se logra transformar la energía de sus enlaces químicos en la energía de los enlaces del ATP y otras sustancias, que proporcionan en forma directa la energía que requieren las células para todas sus funciones. Además, los procesos de síntesis, tanto de moléculas sencillas como de macromoléculas, requieren energía, la cual proviene del ATP y del poder reductor que tienen las moléculas llamadas NADH y NADPH, entre otras. Es interesante señalar que la degradación que sufren las macromoléculas para producir las unidades que las componen hace que se transforme en calor toda la energía de sus enlaces (Bailey y Ollis, 1987; Doran, 1995).

Otra característica del metabolismo es que cada una de sus transformaciones se acelera casi invariablemente por una enzima diferente. Las enzimas son proteínas y son las moléculas que se encargan de catalizar (es decir, de acelerar) las reacciones individuales del metabolismo. Aunque las reacciones químicas de muchos pasos metabólicos pueden ocurrir en forma espontánea, prácticamente todas ellas transcurrirían con una enorme lentitud si no existieran las enzimas. Éstas aceleran mucho (habitualmente mucho más de un millón de veces) las reacciones individuales del metabolismo.

### 2.1.2. Procesos aerobios y anaerobios

Los procesos biológicos se clasifican en forma general como aerobios y anaerobios. Los procesos aerobios se pueden representar como,



Es decir, los sistemas aeróbicos aprovechan la capacidad de los microorganismos de asimilar materia orgánica y nutrientes (nitrógeno y fósforo) para su propio crecimiento, en presencia de oxígeno. Los productos resultantes son agua, dióxido de carbono, y materia orgánica degradada o transformada.

Los procesos anaerobios se pueden representar como,



En el caso de los procesos anaerobios no es necesario el oxígeno para llevar a cabo el metabolismo de degradación o consumo de la materia orgánica, con la generación simultanea de un biogás compuesto por metano y dióxido de carbono.

En un sistema aerobio convencional, el sustrato o carga orgánica se utiliza como una fuente de carbono y energía, lo cual resulta en el crecimiento de los microorganismos. Dos enzimas son las responsables principales involucradas en los procesos aerobios son las di y mono oxigenasas. La última enzima puede actuar tanto sobre compuestos aromáticos como alifáticos, mientras que la primera puede actuar solo sobre compuestos aromáticos. La Figura (2-1) muestra la degradación aerobia de residuos orgánicos.

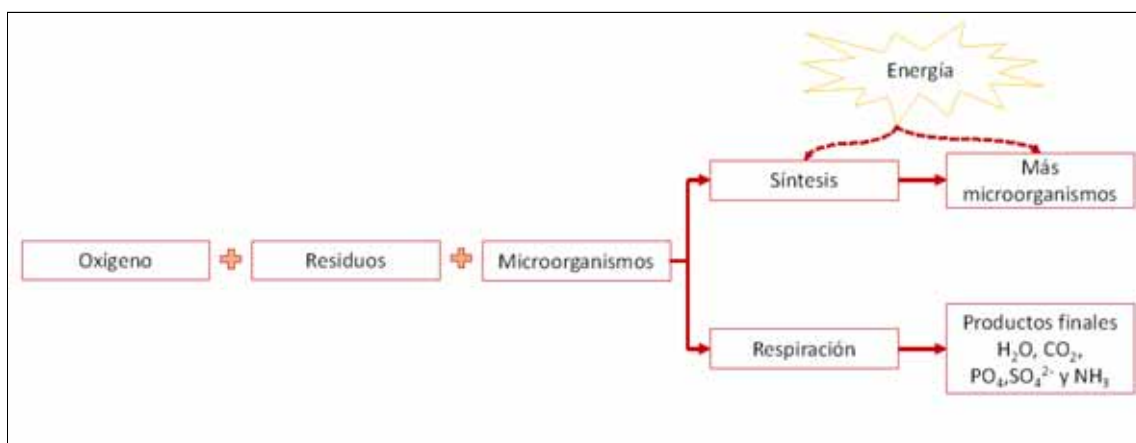


Figura 2-1: Vía de degradación aeróbica.

En el proceso anaeróbico, los compuestos orgánicos complejos se descomponen primero en una mezcla de ácidos grasos volátiles (VFA), en su mayoría ácidos acético, propiónico y butírico. Esto se logra mediante acidogénesis, en la cual interviene un consorcio de bacterias hidrolíticas y

acidógenas (Gottschalk, 1979). Los VFA se convierten a su vez en  $\text{CO}_2$  y metano por la acción de bacterias acetogénicas (acetógenos) y metanogénicas (metanógenos), respectivamente (Zehnder et al., 1982).

La AD ocurre en seis etapas principales (Jeyaseelan, 1997):

1. Hidrólisis de biopolímeros orgánicos complejos (proteínas, carbohidratos y lípidos) en monómeros (aminoácidos, azúcares, ácidos grasos de cadena larga) por la acción de bacterias hidrolíticas (acidógenos).
2. Fermentación de aminoácidos y azúcares por acidógenos.
3. Oxidación anaerobia de VFA y alcoholes por bacterias hetero-acetogénicas.
4. Oxidación anaerobia de productos intermediarios por bacterias hetero-acetogénicas.
5. Conversión de hidrógeno en metano por bacterias metanogénicas que utilizan hidrógeno.
6. Conversión de acetato en metano por bacterias metanogénicas utilizando acetato.

Las rutas de degradación aeróbica como anaeróbica pueden eliminar igualmente compuestos orgánicos complejos de los efluentes, sin embargo, la ruta anaeróbica tiene las siguientes ventajas:

- Biocombustible: Produce metano, un biogás con un valor calorífico bueno de  $24 \text{ MJ} / \text{m}^3$ .
- Menos producción de lodos (residuos del proceso de degradación biológica): El tratamiento aeróbico produce  $2.4 \text{ kg de CO}_2 / \text{kg de DQO}$ , mientras que un proceso anaeróbico produce solo  $1 \text{ kg de CO}_2 / \text{kg de DQO}$ . La eliminación de lodos es una consideración importante ya que representa alrededor del 60 % del costo total del tratamiento. El costo de desechar el lodo producido por una planta anaeróbica es solo el 10 % de la planta aeróbica correspondiente.
- Menos nutrientes: Los requerimientos de nutrientes son un 20 % más bajos para las plantas anaeróbicas que para las plantas aeróbicas.
- Emisión de contaminantes: El proceso de aireación en los procesos aerobios implica la posible volatilización de algunos de los contaminantes orgánicos, convirtiendo la contaminación del agua en contaminación del aire.



Una desventaja de los procesos anaerobios es que se pueden desestabilizar operacionalmente por dos razones que se pueden presentar en la práctica:

1. El ingreso de oxígeno, el cual inhibe a los microorganismos anaerobios.
2. Acumulación de ácidos, los cuales inhiben la etapa de metanogénesis.

### 2.1.3. Efecto de parámetros en procesos biológicos

El diseño y la operación de un proceso biológico dependen de varios parámetros. A continuación se describen los efectos principales de los más importantes:

1. Cantidad de nutrientes disponibles: Este parámetro involucra macronutrientes y micronutrientes (carbono, nitrógeno, fósforo y azufre), ambos muy importantes para el crecimiento de los microorganismos. Además, su ausencia puede generar la inhibición en el proceso (Al Seadi, 2008).
2. Concentración de oxígeno disuelto (procesos aeróbico): La ausencia de este parámetro dentro de un reactor aeróbico es causa inmediata de disminución de la población de microorganismos presentes por lo tanto no se puede generar hidrógeno, además los microorganismos requieren de oxígeno para poder metabolizar el alimento que consumen.
3. Relación entre carga orgánica y microorganismos: El incremento de la carga orgánica puede ocasionar fallas en los reactores químicos ya que es la cantidad de materia que alimenta por unidad de volumen en un tiempo determinado. Si esta carga es menor a la necesaria los microorganismos no se alimentan correctamente y habrá una disminución de los mismos, por el contrario si la carga es mayor a la necesaria puede haber un sobreincremento en la población de microorganismos o bien los microorganismos podrían ser arrastrados a la salida del reactor.
4. pH: Tiene efectos significativos en las rutas metabólicas por lo que está altamente relacionada con la generación del producto final. En un proceso cuyo pH es por debajo de 5 la producción se ve reducida debido a la producción de metabolitos ácidos, que destruye la capacidad de la célula para mantener el pH interno. Estudios demuestran que el pH óptimo para maximizar la velocidad de producción de hidrógeno depende tanto del tipo de microorganismo como

de los sustratos (Nath et al. 2006). El pH que puede considerarse óptimo si esta entre 6.5 y 7.6. Si el pH esta por arriba de 7.8 indica acumulación de amoníaco (Al Seadi, 2008).

5. Temperatura: Los procesos biológicos se llevan a cabo en gran medida a temperatura ambiente. De las diferentes etapas térmicas como son psicofílico, mesofílico y termofílico, comúnmente se considera la termofílica (entre 43 y 55 °C), debido a que dentro de esta zona existe la eliminación de patógenos, crecimiento de la población y una degradación de sustratos sólidos en un tiempo de retención menor. La desventaja de esta zona es la inestabilidad, hay mayor consumo de energía y riesgo de inhibición por amoníaco (Riffat, 2013).
6. Tiempo de residencia: Esta definido como el tiempo promedio que pasa una porción de líquido desde que entra a un reactor continuo hasta que sale del mismo. En procesos biológicos este parámetro es muy importante ya que si no es suficiente la población de microorganismos no consume la cantidad suficiente de sustrato y no se genera la cantidad optima de hidrógeno, así como la población no se incrementa lo suficiente para seguir generando hidrógeno (Al Seadi, 2008).
7. Mezclado: El mezclado es importante para los reactores, tipo tanque agitado, para asegurar una mezcla homogénea y eliminar las resistencias al transporte de masa. Sin embargo, un aumento excesivo de este parámetro perjudica a los microorganismos por el esfuerzo cortante del fluido sobre los microorganismos.

## 2.1.4. Reactores aerobios

### Discos rotatorios en lagunas abiertas

El diseño más simple y más barato utiliza lagunas abiertas y estanques de oxidación, que no son más que pozos abiertos donde se almacena el efluente y se burbujea oxígeno a través del medio líquido usando sopladores o se mezcla el líquido utilizando discos que giran lentamente como se muestra en la Figura (2-2). El lodo que se genera se deposita en el fondo del tanque y se drena de vez en cuando. Las velocidades de transferencia de oxígeno son bajas, y el tiempo de residencia es generalmente del orden de 2 a 7 días. Cada disco está cubierto con una película biológica que degrada los componentes orgánicos disueltos presentes en las aguas residuales. A medida que el disco gira lentamente, lleva una película de las aguas residuales al aire, donde el oxígeno está

disponible para la descomposición biológica aeróbica. El exceso de biomasa producida se separa del disco y cae al canal.

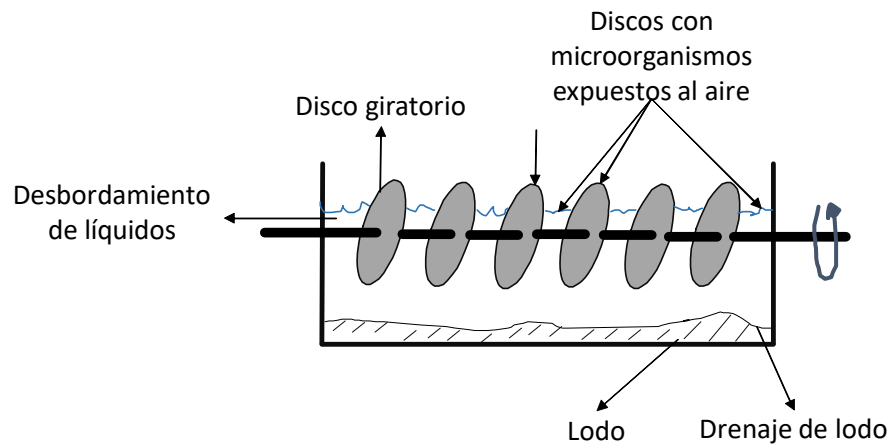


Figura 2-2: Reactor biológico (anaerobio) de discos rotatorios.

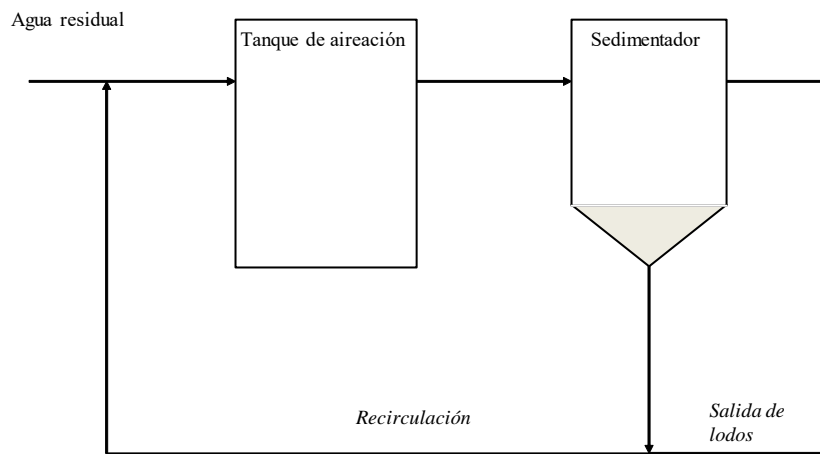


Figura 2-3: Sistema de lodos activados (ASS).

## Tanques agitados

Otro diseño de reactor aeróbico común es el reactor de tanque agitado mecánicamente. En este diseño, el aire se introduce desde la parte inferior a través de un disco dispersor. El sistema de lodos activados (ASS) es una configuración que hace uso de un tanque agitado con aeración. La

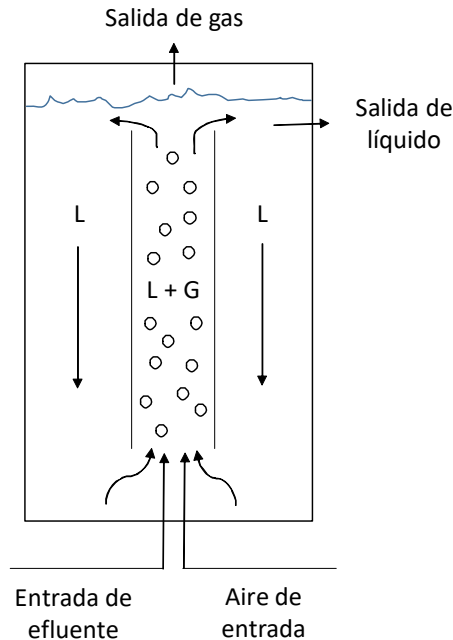


Figura 2-4: Reactor biológico (anaerobio) por elevación de aire.

Figura (2-3) muestra una configuración convencional del ASS. El ASS se usa ampliamente para el tratamiento de aguas residuales e industriales. La operación consiste en alimentar la carga orgánica al tanque de aireación, en el cual existen agregados de microorganismos que degradan la carga orgánica. La corriente de salida del tanque de aireación esta compuesta por una mezcla del agua residual tratada y los agregados de microorganismos. En un tanque de sedimentación se lleva a cabo la separación de estos microorganismos, parte de los cuales se recircula al reactor.

## Elevación de aire

Los reactores por elevación de aire son reactores sin ningún mecanismo de agitación mecánica para mezclar. La turbulencia causada por el flujo de aire ascendente asegura una mezcla adecuada del líquido. Un tubo de aspiración interno se coloca en la sección central del reactor. La introducción del fluido (aire o líquido) provoca un movimiento ascendente y da como resultado un flujo circulatorio en todo el reactor. Debido a las bajas velocidades del líquido, el consumo de energía también es bajo. Estos reactores se pueden usar tanto para microorganismos libres e inmovilizados. El coeficiente de transferencia de masa de oxígeno en este reactor es alto en comparación con los reactores de tanque agitados simples. La Figura (2-4) muestra el esquema de un reactor por

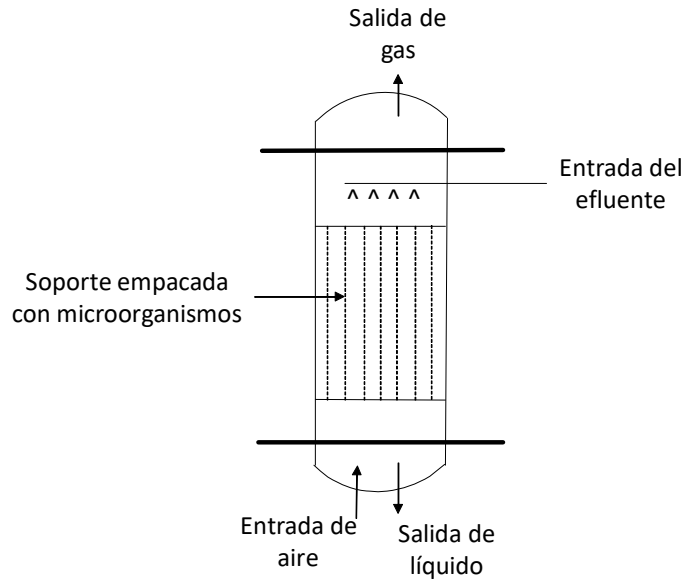


Figura 2-5: Reactor aerobio de lecho fijo.

elevación de aire.

## Lecho fijo

Otros reactores aeróbicos que se utilizan ampliamente son el tratamiento de aguas residuales son los biorreactores de lecho fijo o de lecho fijo con biopelículas adherida. La Figura (2-5) muestra el esquema de un reactor aerobio de lecho fijo. Estos reactores se utilizan ampliamente con células inmobilizadas. El agua residual se bombea hacia la parte superior del reactor y se hace fluir hacia abajo a través de la cama compactada o, a veces, viceversa. El aire se bombea desde abajo. Los microorganismos en el lecho empacado aireado crecen y degradan la materia orgánica contenida en las aguas residuales. Las desventajas de los lechos fijo son el cambio en la porosidad del lecho y la compactación del lecho con el tiempo, lo que resulta en una alta caída de presión a través del lecho y la canalización debido a la turbulencia en el lecho.

## Columnas de burbujeo

Las columnas de burbujas son columnas estrechas y altas con un distribuidor de gas en la parte inferior. La Figura (2-6) muestra el esquema de una columna de burbujeo. La construcción de columnas de burbujeo es muy simple, y se puede lograr un mayor coeficiente de transferencia

de masa que con los reactores de circulación de lazo. Debido a que tienen una amplia distribución del tiempo de residencia y buenas propiedades de dispersión, pueden usarse para el tratamiento aeróbico de aguas residuales. La columna de líquido proporciona una alta presión en el fondo del reactor, dando lugar a una mayor solubilidad del oxígeno. Por lo tanto, la retención de gas en tales reactores es generalmente muy alta.

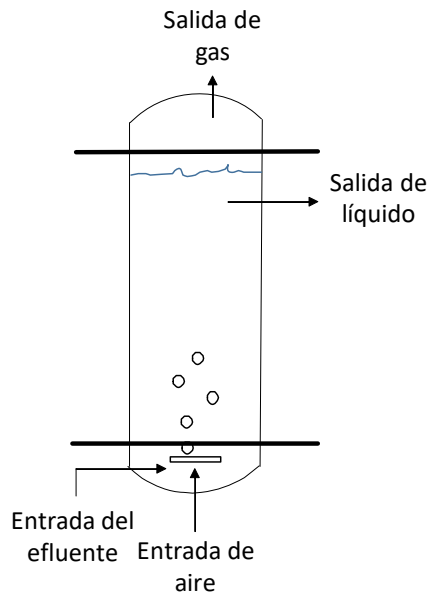


Figura 2-6: Reactor aerobio de columna de burbujeo.

### Lecho fluidizado inverso

Un lecho fluidizado inverso se usa en el tratamiento aeróbico de aguas residuales. La Figura (2-7) muestra la configuración de un lecho fluidizado inverso. La fase sólida consiste en una partícula inerte recubierta con una biopelícula. La fase gaseosa es oxígeno/aire. La fase líquida es el agua residual o la entrada de carga orgánica que debe tratarse. El lecho de sólidos tiene una densidad inferior a la de la fase líquida, pero se crea un estado fluidizado por el flujo descendente del líquido. El gas fluye en contracorriente al líquido. Este modo de operación mejora la velocidad de transferencia de masa, reduce el desgaste de los sólidos y ayuda a que la cama se refluidice fácilmente después de un paro.

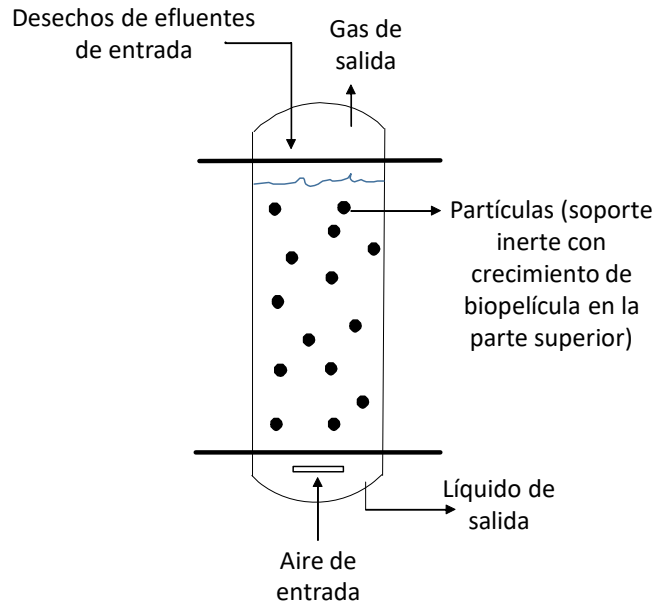


Figura 2-7: Reactor aerobio de lecho fluidizado inverso.

### Fase en suspensión

El biorreactor de fase suspendida es un tanque agitado en el cual el suelo se suspende en agua (con más de 40 % de sólidos) y se mezcla con aire, células microbianas y nutrientes.

### Fase sólida

En el biorreactor de fase sólida, se rocía agua sobre el lodo para ajustar su contenido de humedad. El aire y los nutrientes se alimentan a través de tuberías perforadas. Estos reactores son un tratamiento ex situ muy rentable si el tiempo de biorremediación no es un factor limitante. Además del lento tiempo de degradación, otra desventaja de este último es una degradación no homogénea.

## 2.1.5. Reactores anaerobios

### Discos rotatorios

Los discos rotatorios anaeróbicos son similares a sus equivalentes aeróbicos, excepto que se mantienen en condiciones anaeróbicas. Del mismo modo, los estanques anaeróbicos son comparables

a sus contrapartes aeróbios.

## Película fija

Los reactores de película fija se denominan así porque la biomasa crece sobre un material de soporte fijo como PVC, madera, carbón, roca, etc. La Figura (2-8) muestra el esquema de un reactor aerobio de película. Estos reactores tienen una construcción simple, son buenos para altas carga de entrada, y pueden resistir cargas orgánicas tóxicas. El líquido fluye hacia arriba y el biogás generado se recolecta en la parte superior y se conduce a tanques de almacenamiento. Las principales desventajas de estos reactores son la obstrucción del reactor debido al aumento en el espesor de la biopelícula y/o un aumento en la concentración de sólidos suspendidos en el desecho. Además, una gran porción del volumen del reactor está ocupada por el medio.

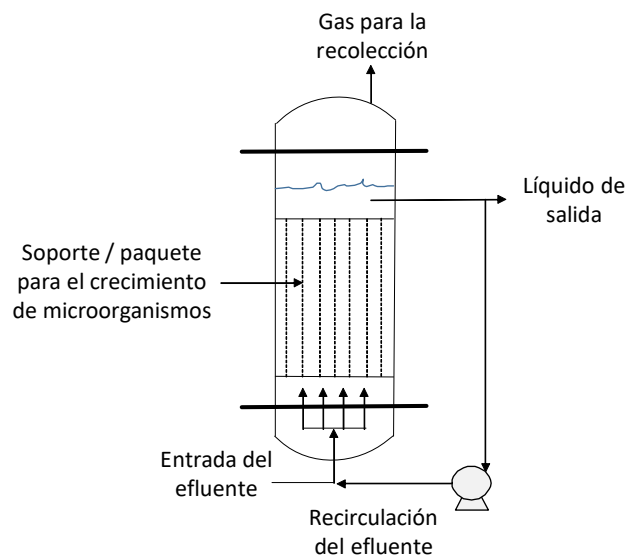


Figura 2-8: Reactor aerobio de película.

## Flujo ascendente de lecho de lodos (UASB)

Las bacterias anaeróbicas, especialmente los metanógenos, tienen una tendencia a formar estructuras granulares auto-inmovilizadas con buenas propiedades de asentamiento, que se emplean en la configuración de flujo ascendente de un manto de mangos (UASB). La Figura (??) muestra



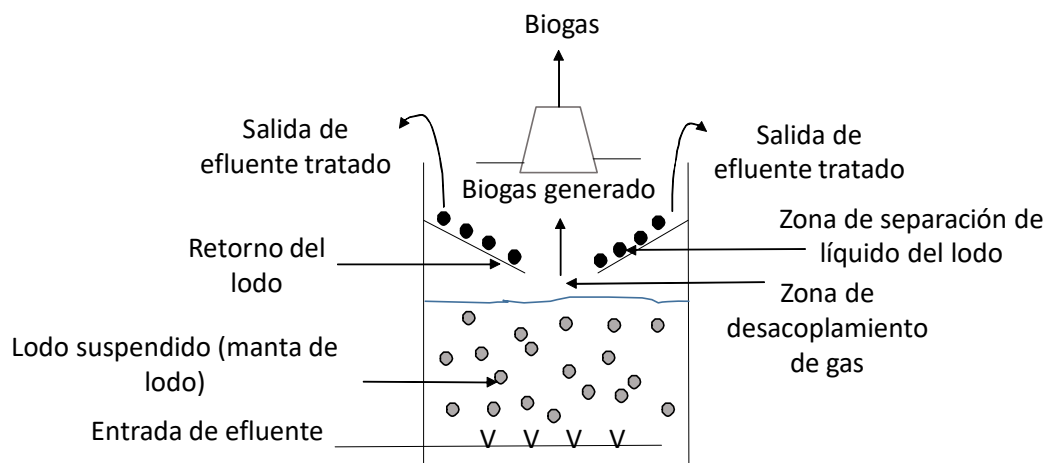


Figura 2-9: Flujo ascendente de lecho de lodos (UASB).

el esquema de un reactor tipo UASB. El manto de mangos consiste en granulos de microorganismos. El efluente fluye por el reactor a través del manto de fango. El sustrato efluente se difunde en el manto de fangos y se degrada por vía anaeróbica. Debido a las mayores concentraciones de biomasa, un reactor UASB puede lograr conversiones más altas que los procesos anaeróbicos convencionales y también tolera fluctuaciones de pH, temperatura y de la alimentación del efluente. Además, dado que no se requiere medio de soporte para la adherencia de biomasa, los costos se reducen. No hay mezcla mecánica, recirculación de lodo o recirculación del efluente dentro del reactor; por lo tanto, el requerimiento de energía es menor. Las desventajas de este reactor son su largo tiempo de puesta en marcha y la necesidad de operadores expertos, ya que el lavado del manto de fangos es posible si el reactor no se controla adecuadamente. Una variación del reactor UASB es el lecho de lodo expandido en el que se emplean velocidades superiores de líquido superficial para lograr la fluidización en la parte superior de la cama, lo que conduce a una buena mezcla y retención de manto de fangos solamente.

### Lecho fluidizado

En reactores de lecho fluidizado anaeróbicos (AnFB), un cultivo mixto de bacterias en forma de una película se hace crecer sobre la superficie de alguna partícula portadora inerte. Estas partículas se fluidizan usando la energía de la corriente de entrada. La velocidad lineal del efluente se mantiene por encima de la velocidad mínima de fluidización, de modo que las partículas cubiertas de película

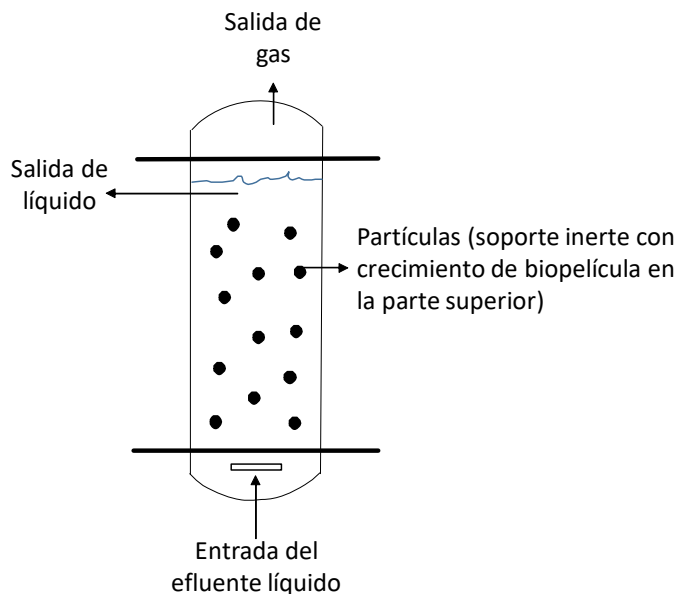


Figura 2-10: Reactor biológico de lecho fluidizado de flujo inverso.

están siempre en movimiento. El sustrato efluente se difunde en la biopelícula y se convierte en VFA y finalmente en metano, que se difunde a través de la biopelícula al seno del líquido. La mezcla y la transferencia de masa que se logra en estos reactores es excelente, por lo que las conversiones resultantes son comparables o incluso superiores a las obtenidas con los reactores UASB. Estos reactores tienen tasas de carga típicas de 25 kg de DQO / m<sup>3</sup> día. Sin embargo, a medida que la biopelícula crece, las partículas cubiertas de película aumentan de tamaño y, por lo tanto, su densidad compuesta disminuye. Otro inconveniente de los reactores AnFB es el alto requerimiento de energía que resulta de las grandes velocidades de recirculación empleadas en estos sistemas (Forster y Wase, 1990).

## Reactor híbrido

Un reactor híbrido es una combinación de un UASB y un reactor de biopelícula fija. Tiene una sección de soporte en la parte superior de la sección fluidizada. Esto ayuda a los microbios a unirse firmemente, evitando el lavado y también aumentando la población microbiana en el reactor. Además, los microbios son más resistentes a los cambios de carga de choque. La pérdida de lodo es mínima y las velocidades de transferencia de masa son más altas.

### 2.1.6. Modo de operación

Los reactores funcionan en modo discontinuo o lote, semi-lote, y continuo (en tanques agitados o en recipientes tubulares).

#### Lote

El concepto de un reactor del lote considera que los reactantes se carga instantáneamente y se homogeneizan perfectamente en el reactor. Los reactores lote se usan para operaciones de pequeña escala, para reacciones de laboratorio, producción de productos costosos (especialidades) o para aquellos procesos que la conversión a un proceso continuo es difícil o imposible. Sus desventajas de esta opción es la baja producción (i.e. generación de producto por unidad de tiempo), y que cada vez que se usa se debe cargar, operar y descargar. El tiempo que se carga y descarga es tiempo perdido de producción. No obstante, si el valor del producto es muy alto y las cantidades de la producción requeridas son bajas, entonces el sistema del lote es a menudo una opción del reactor óptima. Como esta no es una unidad especializada, se pueden programar muchos tipos diferentes de productos y procesarse en la misma unidad. Las ventajas de un reactor lote son su construcción simple, poca instrumentación y bajos costos de construcción, y flexibilidad de operación. El concepto del reactor lote secuencial (SBR) ha ganado considerable interés, donde la secuencia de operaciones como el llenado, la reacción y la descarga parcial se llevan a cabo en el mismo reactor.

#### Semi-lote

Muchos de los reactores del lote son realmente una operación por semi-lote (también llamados lote alimentados). Los reactores semi-lote tienen algunos reactantes que se cargan en el reactor al inicio de la reacción, y gradualmente se se agregan otros reactantes durante la reacción. Aunque el reactor semi-lote tiene las mismas desventajas que el lote, puede tener un buen control de temperatura y minimizar reacciones secundarias o no deseadas al agregar en forma controlada parte de los reactivos. El reactor semi-lote es muy usado para reacciones en dos fases por ejemplo líquido – gas, donde el líquido es la fase discontinua y el gas la continua que se burbujea constantemente en el medio líquido. Muchos bioreactores operan en semi-lote, debido a que se alimenta continuamente oxígeno a la colonia microbiana para su subsistencia, aun cuando el substrato se carga inicialmente

como en los reactores lote, con la adición de oxígeno el volumen de la solución cambia muy poco a lo largo del curso del proceso.

### **Reactor continuo de tanque agitado (CSTR)**

En el CSTR los reactivos se introducen y los productos se extraen simultáneamente y en forma continua. Por lo general, se considera que un CSTR es homogéneo y por lo tanto las propiedades de la mezcla reactante se consideran uniformes en cualquier parte dentro del recipiente de reacción y por lo tanto son idénticas a las propiedades de la corriente de salida. Otra consideración importante es que la corriente de entrada se mezcla instantáneamente con la mezcla presente en el reactor. En la práctica, si un elemento de material reactante que entra se distribuye uniformemente por todo el tanque en un tiempo mucho más corto que el tiempo de residencia promedio en el tanque, entonces el tanque se puede considerar bien mezclado. Además de las ventajas asociadas a la operación continua, la principal ventaja del CSTR es su fácil control de temperatura. Una gran desventaja del reactor tanque agitado es que la conversión de reactante por volumen de reactor es menor que el reactor tubular para la mayoría de reacciones de interés industrial. Por lo tanto, es posible que sea necesario contar con un arreglo en series de tanques agitados para alcanzar una conversión adecuada. Por otro lado, debido a que un CSTR diluye la alimentación, la velocidad de reacción disminuye, pero esto puede ser deseable si los contaminantes son tóxicos para los organismos o si exhiben inhibición del sustrato. Los CSTR requieren el uso continuo de un recipiente, lo que significa mayores costos de operación y mantenimiento. En general los procesos continuos conducen a un menor costo de mano obra debido a la eliminación de operaciones auxiliares (p.ej. el constante llenado y vaciado de recipientes), los cuales permiten una mayor facilidad de implementar el control automático, además de que existe una mayor uniformidad en las condiciones de reacción, y por lo tanto mayor uniformidad en la calidad del producto.

### **Reactor continuo de flujo pistón (PFTR)**

Durante el flujo pistón, todas las partículas que entran en el reactor al mismo tiempo deben salir simultáneamente. Las características esenciales del reactor de flujo de pistón requieren que no exista un mezclado longitudinal de los elementos del fluido conforme ellos se mueven a través del reactor, y que todos los elementos de fluido tomen la misma longitud de tiempo para moverse

de la entrada del reactor a la salida. El PFTR generalmente toma la forma de un recipiente cilíndrico a través del cual los reactantes fluyen. Es decir es una operación continua en la cual hay un movimiento constante de uno o de todos los reactivos en una dirección espacial promedio (los reactivos entran en un extremo del sistema y salen por el otro) y en el que no se hace intento alguno por inducir el mezclado entre los elementos del fluido en ningún punto a lo largo de la dirección de flujo. El PFTR es relativamente fácil de mantener ya que no tiene partes móviles, y normalmente conduce a conversiones más altas por volumen del reactor de cualquiera de los reactores de flujo. Otras ventajas son que se pueden manejar altos flujos y no se tienen efectos de mezclado. Las desventajas del reactor tubular de flujo pistón son una instrumentación costosa, altos costos de operación (mantenimiento, limpieza), y flujo de calor no uniforme.

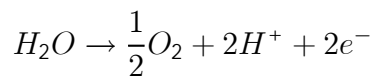
## 2.2. Producción de hidrógeno por Métodos Convencionales

Debido a que las emisiones de dióxido de carbono que son generadas por la combustión del carbón, gas natural y petróleo, se han generado problemas ambientales de gran importancia además la demanda energética va en aumento, se han buscado fuentes alternativas para reducir el consumo de estos recursos. El hidrógeno es un buen portador de energía, renovable y sostenible (Veras et al. 2017). Pero este recurso puede producirse a partir de una gran diversidad de combustibles fósiles y fuentes de energía sostenibles, por lo que el tipo de proceso empleado para la producción determina la composición de las emisiones que se generan (Çelik et al. 2017). Los métodos convencionales de producción de gas de hidrógeno son procesos intensivos en energía que requieren altas temperaturas.

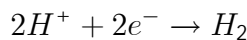
### 2.2.1. Electrólisis

La electrólisis es el proceso por el cual se disocia del agua en hidrógeno y oxígeno por medio de una corriente, este método generalmente se utiliza en la industria (Dincer et al. 2015). La electrólisis del agua puede ser la tecnología más limpia para la producción de gas de hidrógeno. Sin embargo, la electrólisis debe usarse en áreas donde la electricidad es económica, ya que los costos de electricidad representan el 80% del costo de operación de la producción de  $H_2$ . Para llevar a cabo la electrólisis se requiere un proceso electroquímico que involucra reacciones en el

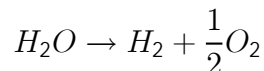
ánodo y cátodo. En el ánodo,



y en el cátodo,



en general,



Los diferentes métodos que hay para la electrólisis de agua incluyen a los electrolitos de agua alcalina, membranas de intercambio de protones y la electrólisis de agua de óxido sólido (Chi et al. 2018).

### 2.2.2. Reformado de vapor

En este método el gas o combustible fósil en fase líquida se convierten en el gas principal de la reacción. El proceso más usado a nivel industrial es el reformado de vapor de metano (SMR) ya que es el método más económico. En el SMR se requiere una gran cantidad de energía para llevarse a cabo. El metano y el vapor reaccionan para producir hidrógeno y monóxido de carbono (Çelik et al. 2017) de acuerdo a,



generalmente estas reacciones se llevan entre 500-900 °C y a una presión entre 20-35 atm. Por lo tanto, la desventaja de este método es la generación de CO como uno de los productos finales y se requieren altas temperatura y presiones en dicho proceso (Voldsund et al. 2016).

## 2.3. Producción de hidrógeno por Métodos Biológicos

En estos procesos se utilizan microorganismos para la producción de hidrógeno a partir de desechos orgánicos ricos en almidón y celulosa (papa, estiércol, suero de leche, aguas residuales de destilería, melazas), pulpas y desechos de la industria del papel, desechos de la producción de biocombustibles y lodo del alcantarillado (Łukajtis et al. 2018). Los métodos de producción biológica de hidrógeno son la biofotólisis, la fermentación oscura, y la foto-fermentación.

### 2.3.1. Biofotólisis indirecta

La biofotólisis es un método por el cual se descompone el agua en condiciones ambientales a través de la energía solar y cianobacterias como son las microalgas. Se puede representar de la siguiente manera,

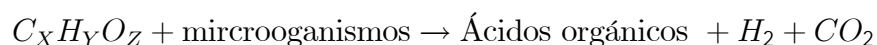


Este proceso presenta como desventaja una ruta biológica compleja, sin embargo, la descomposición del agua en hidrógeno y oxígeno no genera ningún otro residuo. Además se considera un proceso económico y la temperatura y presión requerida son bajas (Çelik et al. 2017).

### 2.3.2. Fermentación oscura

La generación de hidrógeno a través de la fermentación oscura es un proceso complejo en el que intervienen diferentes grupos microbianos que crecen en oscuridad, principalmente del género *Enterobacter*, *Bacillus* y *Clostridium*, los cuáles actúan de manera coordinada y secuencial, para descomponer la materia orgánica, en ausencia de oxígeno libre. Es uno de los métodos más prometedores para la producción de hidrógeno a partir de biomasa.

En este proceso, la energía bioquímica de la biomasa, como es la glucosa principalmente o residuos orgánicos, se pueden convertir en fuentes de energía obteniendo hidrógeno, ácidos orgánicos y dióxido de carbono. Las bacterias presentes en la fermentación oscura son anaerobias debido a que favorecen el proceso y requiere de condiciones oscuras y anóxicas. La reacción se representa de la siguiente manera,



La fermentación oscura tiene la ventaja de que trabaja a temperatura y presión ambiente, sin embargo, como producto resultante se obtiene dióxido de carbono (Çelik et al. 2017).

Dentro de las consideraciones prácticas del proceso, el pH y la presión parcial de los gases son algunos de los parámetros más críticos.

- El pH influye tanto en la cantidad de hidrógeno producido (máximo con pH 5-6), así como en los productos de fermentación. Con valores de pH entre 4 y 6 se produce más butirato

que acetato, mientras que si se eleva el pH hasta 6.5-7 la proporción de butirato y acetato son semejantes.

- La presión parcial de hidrógeno es otro parámetro crítico. Cuando la concentración de hidrógeno en el medio aumenta, las rutas metabólicas se re-orientan para producir sustratos más reducidos como lactato, etanol, acetona, butanol o alanina, lo que provoca una disminución en la producción de hidrógeno.
- La presencia de microorganismos consumidores de  $H_2$  (metanógenos y acetógenos) disminuye el rendimiento del sistema. Para evitarlo se realiza un choque térmico antes del proceso. El ajuste del tiempo de retención hidráulico (HRT, Hydraulic Retention Time) evita la acumulación excesiva de  $H_2$  y también evita el desarrollo de los consumidores de hidrógeno.

Las ventajas de la fermentación oscura incluyen:

1. Las tasas de producción pueden ser órdenes de magnitud mayores que otros sistemas de obtención de hidrógeno.
2. Pueden producir hidrógeno de forma constante.
3. Gran posibilidad de escalado y aplicación industrial a corto plazo.
4. No depende de fuentes de luz externa por lo que no requiere transparencia en el licor en el que están presentes los microorganismos.
5. Construcción relativamente simple, la operación demanda poca energía.

Los inconvenientes de la fermentación oscura son:

1. Los sistemas de producción de hidrógeno son más complejos que aquellos destinados a la producción de metano.
2. Bajo rendimiento.
3. El producto líquido requiere tratamiento posterior debido a su alto contenido en ácidos grasos volátiles.



### 2.3.3. Foto-fermentación

La fotofermentación es un proceso bioquímico en el cual se requiere de temperatura y presión baja y también necesita de microorganismos que sean foto-sensibles, los cuales metabolizan la materia que se suministra en el proceso. Se representa de la siguiente manera,



Como se puede observar en la reacción anterior uno de los productos finales de este proceso es el dióxido de carbono. Las bacterias fotosintéticas sin azufre (PNS) tienen la capacidad de convertir los VFA a  $H_2$  y  $CO_2$  en condiciones anoxigénicas. Las bacterias PNS también tienen la capacidad de usar fuentes de carbono como glucosa, sacarosa, succinato para la producción de  $H_2$ . Las bacterias PNS más ampliamente conocidas que se usan en la producción foto-fermentativa de  $H_2$  son *Rhodobacter sphaeroides*, *Rhodobacter capsulatus*, *Rhodobacter sulfidophilus*, *Rhodopseudomonas palustris* y *Rhodospirillum rubrum*. Las enzimas hidrogenasa y nitrogenasa se han detectado en las bacterias PNS. Sin embargo, la nitrogenasa es la principal enzima responsable de la producción molecular de  $H_2$  en condiciones anóxicas.

Las ventajas de las bacterias moradas no azufradas (PNBS) son que no producen oxígeno, convierten una amplia variedad de sustratos orgánicos y capturan fotones en un amplio espectro de luz (300–1,000  $\mu m$ ). La fotofermentación ha sido ampliamente investigada con medios sintéticos, varias corrientes de desechos orgánicos, hidrolizados y efluentes de fermentaciones oscuras. Muchas corrientes de desechos diferentes de la industria alimentaria, como los productos lácteos, la melaza, los residuos de almazara (especialmente en el Mediterráneo) y el tofu (especialmente en Asia), se pueden convertir directamente mediante PNBS utilizando la luz como fuente de energía externa.

Los parámetros más importantes son:

1. Relación C/N: Uno de los parámetros importantes de la materia prima es la proporción de carbono a nitrógeno (relación C/N). Es esencial que la concentración de la fuente de N sea lo suficientemente baja para evitar la represión de los niveles de expresión de nitrogenasa.
2. Acidez: Además, la capacidad de amortiguamiento de la acidez debe ser lo suficientemente alta para mantener el pH entre 6.5 y 8.0. Esto es de particular importancia porque es muy difícil controlar el pH en biorreactores con una gran superficie, que son comunes en la

foto-fermentación para facilitar la penetración de la luz. Las altas concentraciones de ácido orgánico tienen un efecto perjudicial sobre el inicio del proceso de fotofermentación. Por lo tanto, la concentración de sustrato requiere dilución, lo que aumenta la demanda de agua a pesar de que parte del agua puede provenir de la recirculación de aguas residuales tratadas de todo el proceso.

3. Penetración de la luz: Las materias primas e hidrolizados crudos no son transparentes y contienen partículas que absorben la luz en el fotobiorreactor. Por ejemplo, la penetración de la luz en el reactor a una profundidad de 1 cm es del 51 % para el efluente de melaza en la fermentación oscura (DFE) en comparación con el 89 % para un medio artificial claro. Para permitir la mayor penetración de luz por área de superficie, los mejores reactores son del tipo de panel plano o tubular. La penetración de la luz es uno de los parámetros más importantes para obtener altos rendimientos de hidrógeno, y por lo tanto, el diámetro del reactor tubular no debe ser demasiado grande. Para recibir porciones similares de luz, se puede aplicar una alta recirculación, que también es una forma apropiada de mezclar el cultivo.
4. Impurezas de oxígeno: La materia prima debe mantenerse lo más anaeróbica posible. El oxígeno no mata al PNSB, pero cambia su metabolismo y por lo tanto disminuye la tasa de producción de hidrógeno y el rendimiento.

Entonces, el proceso de foto-fermentación requiere un control riguroso (que incluye la penetración de la luz, el pH, la temperatura, la concentración del sustrato, la mezcla adecuada en reactores con una relación alta de área superficial a volumen y densidad celular).

La Figura (2-11) presenta un comparativo de los procesos biológicos de producción de hidrógeno. Donde los procesos fermentativos representa la mejor opción debido a que son trabajos en los que se ha implementado control, su proceso requiere de desechos orgánicos, el proceso no es tan agresivo con el medio ambiente, etc.

## 2.4. Modelado de Procesos

Una manera de hacer más entendible un proceso matemáticamente es usando un modelo matemático que pueda representar los fenómenos de reacción y transporte más importantes. La

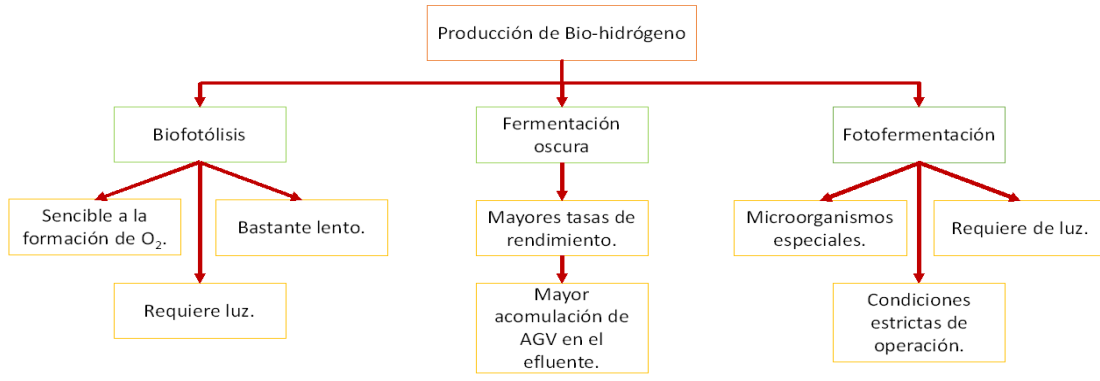


Figura 2-11: Comparación de la producción de hidrógeno y algas.

formulación de las ecuaciones de un modelo generalmente consiste en expresar las leyes físicas o principios de conservación en símbolos apropiados. Los principios de conservación para problemas físicos son usualmente los de balances de masa, momentum o energía. Al generalizar estos conceptos al caso de sistemas de flujo, se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales de cambio para la transferencia de energía, masa y momentum.

### 2.4.1. Balances de materia y energía

Los principios básicos del modelado matemático de procesos son la aplicación de las ecuaciones de conservación de masa y energía. El balance de componentes se escribe como,

$$\begin{aligned}
 (\text{acumulación de masa de } i) &= (\text{entrada de masa de } i) - (\text{salida de masa de } i) \\
 &+ (\text{producción de masa de } i)
 \end{aligned}$$

Los balances de energía son necesarios siempre y cuando ocurran cambios importantes de temperatura. El balance de energía se puede escribir como,

$$\begin{aligned}
 (\text{acumulación de energía}) &= (\text{entrada de energía}) - (\text{salida de energía}) \\
 &+ (\text{producción de energía}) + (\text{transferencia de energía})
 \end{aligned}$$

Los casos de estudio que se tomaron de la literatura para realizar este trabajo primeramente

plantea un modelo matemático que describe el proceso, descrito mediante balances de materia representado por un sistema de ecuaciones diferenciales de cuatro y diez ecuaciones, debido a que la temperatura en ambos casos permanece constante se consideran procesos isotérmicos, por esto no se considera necesario llevar a cabo balances de energía.

### 2.4.2. Modelado de bioprocesos

Los modelos utilizados para describir los procesos biotecnológicos pueden clasificarse en cuatro grupos según el nivel de detalle y complejidad.

1. Modelos estructurados: En los modelos estructurados se consideran las características internas de la célula o sus partes (metabolitos intermedios, procesos celulares, etc.).
2. Modelos no estructurados: La biomasa se representa con una sola variable (usualmente, la concentración total), al no considerar la estructura celular interna.
3. Modelos segregados: Un modelo segregado considera a la población de células como una colección de conjuntos de células, donde cada conjunto tiene a su vez diferentes propiedades (por ejemplo: diferente edad y/o productividad).
4. Modelo no-segregado: En estos modelos no se considera la heterogeneidad de la población celular, es decir se supone células promedio.

La Figura (2-12) representa la ubicación de las cuatro combinaciones de modelos posibles, en función de la complejidad matemática y el nivel de detalle del proceso.

### 2.4.3. Modelado de reacciones biológicas

La ley fundamental de una reacción química es la “ley de acción de las masas”. Esta ley describe la velocidad a la cual los reactantes químicos, ya sean macromoléculas grandes o simples iones, se colisionan e interaccionan para formar diferentes combinaciones químicas. Por ejemplo, suponiendo que se tienen dos reactantes químicos, A y B, que reaccionan bajo colisión para formar el producto C,





Figura 2-12: Diferentes tipos de complejidad en modelos de Bioprocesos.

La velocidad de esta reacción se puede establecer a partir de la ley de acción de las masas, la cual establece que la velocidad es proporcional al producto de las concentraciones de A y B con un factor de proporcionalidad que depende de las formas geométricas y tamaños de las moléculas reactantes y de la temperatura de la mezcla. Al combinar estos factores, la velocidad de formación del producto  $C$  es,

$$\frac{dC}{dt} = kAB$$

donde la constante  $k$  se denomina la constante de velocidad para la reacción. Las reacciones que siguen la cinética de acción de las masas se denominan reacciones elementales. Las reacciones que no siguen la cinética de acción de las masas usualmente proceden por un mecanismo complejo que consiste de dos o mas pasos de reacción elementales.

Comúnmente el caso con reacciones bioquímicas es que los esquemas de reacción elementales no se conocen o son muy complicados para deducirlos. Por ejemplo, en la mayoría de reacciones bioquímicas se llevan a cabo reacciones inversas, de modo que el esquema de reacción considerando los mismos compuestos se escribe como la Ec. (2.1),



donde  $k_1$  y  $k_2$  denotan las constantes de velocidad de la reacción directa e inversa respectivamente. En este caso, debido a que la cantidad de A se consume por la reacción directa y se produce por

la reacción inversa, la velocidad de cambio de  $A$  esta dada por la Ec. (2.2),

$$\frac{dA}{dt} = -k_1AB + k_2C \quad (2.2)$$

Un modelo para explicar la desviación de la ley de acción de las masas para describir la cinética de reacciones biológicas se propuso por Michaels y Menten. En su esquema de reacción se considera una reacción bioquímica, donde una enzima  $E$  convierte el substrato  $S$  en el producto  $P$  a través de un proceso de dos pasos. Primero  $E$  se combina con  $S$  para formar un complejo  $C$  el cual se rompe en el producto  $P$  liberando  $E$  en el proceso. El esquema de reacción se representa por la Ec. (2.3),



Al aplicar la ley de acción de las masas al mecanismo dado por la ecuación (2.3), conduce a cuatro ecuaciones diferenciales (2.4),

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= k_2C - k_1SE \\ \frac{dE}{dt} &= (k_2 + k_3)C - k_1SE \\ \frac{dC}{dt} &= k_1SE - (k_2 + k_3)C \\ \frac{dP}{dt} &= k_3C \end{aligned} \quad (2.4)$$

se puede observar que

$$\frac{dE}{dt} + \frac{dC}{dt} = 0$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned} \frac{d(E + C)}{dt} &= 0 \\ E + C &= cte = E_0 \end{aligned}$$

Michaels y Menten supusieron que el substrato se encuentra en equilibrio con el complejo,

$$\begin{aligned}
\frac{dS}{dt} &= 0 \\
k_2 C &= k_1 S E \\
k_2 C &= k_1 S (E_0 - C) \\
k_2 C + k_1 S C &= k_1 S E_0 \\
C(k_2 + k_1 S) &= k_1 S E_0 \\
C &= \frac{k_1 E_0 S}{(k_2 + k_1 S)} = \frac{E_0 S}{(k_2/k_1 + S)} = \frac{E_0 S}{(k_s + S)}
\end{aligned}$$

La velocidad a la cual se forma el producto esta dada por la Ec. (2.5),

$$\mu(s) = \frac{dP}{dt} = k_3 C = \frac{k_3 E_0 S}{k_s + S} = \frac{\mu_{\text{máx}} S}{k_s + S} \quad (2.5)$$

donde  $k_s = k_2/k_1$ , y  $\mu_{\text{máx}} = k_3 E_0$ .

## 2.5. Análisis Matemático y Numérico

El análisis matemático es útil para conocer propiedades importantes del proceso que describen a partir del modelo matemático. Para fines de control de procesos, dos propiedades importantes son los puntos de equilibrio y la estabilidad de los puntos de equilibrio.

### 2.5.1. Puntos de equilibrio

Los valores  $(x^*, y^*)$  de una función  $f(x, y)$  que hacen que se cumpla la igualdad a cero,

$$f(x^*, y^*) = 0 \quad (2.6)$$

se conocen como puntos críticos, punto de equilibrio, o punto estacionario. En un punto crítico  $c$ ,  $f(c) = 0$ . Si  $c$  es un punto crítico, entonces  $y(x) = c$  es una solución constante de la EDO. Si se considera que  $y(x)$  es una solución no-constante de la EDO de primer orden, y que  $c$  es un punto crítico, básicamente existen tres tipos de comportamiento de la solución  $y(x)$  cerca del punto de equilibrio  $c$ .

- Cuando la dirección de las flechas en un campo de dirección se dirigen hacia  $c$ , las soluciones  $y(x)$  a partir de una punto inicial  $(x_0, y_0)$  cercano a  $c$  exhiben comportamiento asintóticamente estable, es decir,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} y(x) \rightarrow c$$

en este caso se dice que  $c$  es un atractor.

- Cuando la dirección de las flechas en un campo de dirección se alejan de  $c$ , las soluciones  $y(x)$  a partir de una punto inicial  $(x_0, y_0)$  cercano a  $c$  exhiben comportamiento inestable. En este caso, el punto de equilibrio es inestable o repulsor.

## 2.5.2. Estabilidad de los puntos de equilibrio

Primeramente se entiende por estabilidad cuando la evolución de las variables de un sistema se mantienen en una región acotada. En un punto de equilibrio estable la trayectoria  $x(t)$  permanece cercana aun punto de equilibrio si la condición inicial  $x_0$  es cercana a ese mismo punto. En un punto de equilibrio inestable la trayectoria  $x(t)$  diverge del punto de equilibrio si la condición inicial  $x_0$  es cercana a ese mismo punto.

Para evaluar la estabilidad de un punto de equilibrio se tienen tres alternativas principales:

1. Simulaciones numéricas: Resolver el sistemas de ecuaciones diferenciales que describen al proceso a analizar a partir de diferentes condiciones iniciales alrededor de los puntos de equilibrio.
2. Método directo de Lyapunov: La teoría de estabilidad proporciona las bases para estudiar la estabilidad de un modelo no lineal por medio del método directo. El método directo consiste en proponer una función, denominada función de Lyapunov, que depende de los estados del sistema, la cual representa la energía del sistema, y probar que la derivada de esta función es decreciente.
3. Método indirecto de Lyapunov: El método indirecto de Lyapunov proporciona una alternativa para estudiar la estabilidad de un sistema no-lineal a partir de las propiedades de los valores propios de su aproximación lineal.



La simulación numérica tiene la desventaja de llevar a cabo muchas simulaciones numéricas. Por otro lado, el método directo tiene la dificultad de encontrar la función de Lyapunov apropiada. Así, la aproximación lineal del modelo no-lineal del proceso es una de las más utilizadas.

Para un sistema autónomo lineal de la forma (2.7),

$$\frac{dx}{dt} = Ax \quad (2.7)$$

con  $\det A \neq 0$ , sea  $x = x(t)$  la solución que satisface la condición inicial  $x(0) = x_0$ , donde  $x_0 \neq 0$ . El punto de equilibrio se clasifica como,

1. Estable asintóticamente,  $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0$  si y solamente si los eigenvalores de  $A$  tienen parte real negativa.
2. Periódico,  $x(t)$  es periódico si y solo si los eigenvalores de  $A$  son puramente imaginarios.
3. Inestable. En todos los otros casos, dada una vecindad alrededor del origen existe al menos un  $x_0$  en la vecindad para la cual  $x(t)$  sera no acotado conforme  $t$  se incrementa.

### 2.5.3. Linealización

Es raramente posible determinar la estabilidad de un punto crítico de un sistema no-lineal al encontrar soluciones explícitas. Una forma alterna es remplazar el termino no-lineal  $f(x)$  en el sistema autónomo original, por el término lineal  $A(x - x^*)$  que aproxima  $g(x)$  en una vecindad de  $x^*$ . Este proceso se denomina linealización. Las bases de la linealización es la expansión en series de Taylor las funciones no-lineales y eliminar los términos no-lineales (potencias  $\geq 2$ ).

Para un sistema no-lineal de la forma (2.8),

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (2.8)$$

se puede aproximar en una vecindad del punto crítico  $x^*$  por el sistema lineal de la forma (2.7), usando,

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{x^*}$$

esta matriz se denomina matriz Jacobiana.

## 2.5.4. Función de transferencia

En un sistema lineal de ecuaciones, se puede definir la función de transferencia como la relación entre la señal de salida de la transformada de Laplace  $Y(s)$  y la señal de entrada de la transformada de la Laplace  $U(s)$  suponiendo que las condiciones iniciales son nulas. La función de transferencia del sistema  $G(s)$  está representado por la Ec. (2.9),

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{b_m s^m + b_{m-1} s^{m-1} + \dots + b_1 s + b_0}{a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + b_1 s + b_0} \quad (2.9)$$

Algunas de las ventajas que presenta este método es que tiene una representación más simple de un sistema lineal, representado por una división de polinomios en  $s$ , además permite observar la forma de la señal sin llevar a cabo la resolución de la ecuación diferencial.

Un sistema dinámico lineal, para fines de control, se puede escribir por el sistema de ecuaciones diferenciales de la forma (2.10),

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$x(t_0) = x_0$$

donde  $x(t)$  es el estado,  $u(t)$  es la entrada,  $y(t)$  es la salida,  $x(t_0)$  es la condición inicial.  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$  son matrices de dimensiones adecuadas y coeficientes constantes. Tomando la transformada de Laplace para el sistema (2.10) con condiciones iniciales cero  $x_0 = 0$  y re-ordenando se obtiene,

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = C(sI - A)^{-1}B + D \quad (2.11)$$

la Ec. (2.11) se conoce como la función de transferencia del proceso y se puede considerar como un modelo entrada-salida del sistema.

## 2.5.5. Simulacion numérica

Las simulaciones numéricas estan descritas por la obtención de resultados visuales de un proceso, cuando se realiza la solución de las ecuaciones que gobiernan el proceso, predecir como se encuentra un sistema, como se comporta el campo de velocidades y presión de un fluido, así mismo como reaccionan los componentes de salida de un procesos. En ingeniería resulta ser una herramienta muy importante ya que en muchas ocasiones se resuelven problemas con ecuaciones diferenciales parciales que no pueden ser resueltos de manera analítica.

La simulación numérica se puede realizar mediante cinco pasos: (i) la identificación del problema, (ii) la localización de los datos necesarios, (iii) la selección de la plataforma de simulación, (iv) la utilización de los recursos de computo adecuado y, (v) el análisis de los resultados obtenidos.

Para resolver las ecuaciones diferenciales no-lineales en este trabajo se utilizó el lenguaje de programación Matlab para programar los métodos numéricos necesarios, aunque también hay otros lenguajes como Fortran. Para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias un método conocido es el Runge Kutta, que es un conjunto de métodos iterativos para la aproximación de soluciones, cuando se tiene un problema de valor inicial.

El algoritmo de Runge-Kutta es:

$$y_{n+1} \approx y_n + \Delta t \sum_{i=1}^e \beta_i k_i \quad (2.12)$$

donde:

$$k_i = f(y_n + h\alpha_{ij}k_j, x_n + \gamma_i h) \quad i = 1, 2, \dots, e \quad (2.13)$$

y  $\alpha_{ij}$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  son constantes propias del esquema numérico. Los esquemas Runge-Kutta pueden ser explícitos o implícitos dependiendo de las constantes  $a_{ij}$  del esquema. Para el método de Runge-Kutta de cuarto orden, el cual es el algoritmo más usado para resolver numéricamente un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se tiene:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (2.14)$$

donde:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(y_n, x_n) \\k_2 &= f(y_n + \frac{h}{2}k_1, x_n + \frac{h}{2}) \\k_3 &= f(y_n + \frac{h}{2}k_2, x_n + \frac{h}{2}) \\k_4 &= f(y_n + hk_3, x_n + h)\end{aligned}$$

En el algoritmo el valor  $y_{n+1}$  está determinado por el valor presente  $y_n$  más el producto del tamaño del intervalo de tiempo  $h$  por un promedio ponderado de pendientes. el error de aproximación del método de RK cuarto orden es del orden al incremento  $h^4$ .

## 2.6. Optimización de Procesos

La teoría de optimización proporciona las bases matemáticas para establecer las mejores condiciones para un problema dado.

### 2.6.1. Problema de optimización

Los tres componentes principales de un problema de optimización son:

1. La función objetivo o criterio a optimizar, dada por la Ec. (2.15), que comúnmente se define como un problema de minimizar una función que depende de las variables del proceso a optimizar  $x$ , costos, etc., y con  $u$  variables de decisión o que se pueden ajustar,

$$\min_u J = f(x, u, \$) \quad (2.15)$$

2. La región o zona de búsqueda de soluciones aceptables, la cual se establece por las restricciones del problema, las cuales pueden ser de igualdad (2.16),

$$h(x, u) = 0 \quad (2.16)$$

o desigualdad (??),

$$g(x, u) \leq 0 \quad (2.17)$$

3. El procedimiento o método de solución del problema de optimización.

### 2.6.2. Métodos de optimización

En años recientes, la optimización ha llegado a ser una herramienta muy usada gracias al poder de cómputo actual. Desde un punto de vista de ingeniería, no se esperaba que un ingeniero desarrollará técnicas de optimización, la cual es un área de matemáticos, sin embargo, se espera que un ingeniero sea capaz de:

- Reconocer una situación que conduce a un problema de optimización.
- Formular el problema de optimización, i.e. definir las variables, el criterio, y las restricciones.
- Identificar el tipo de problema de optimización resultante.
- Encontrar y aplicar una herramienta de optimización adecuada (tal vez disponible en Matlab).

Los métodos o técnicas de optimización incluyen programación lineal, programación no-lineal, algoritmos genéticos, y programación dinámica.

#### Programación lineal

La programación lineal es una técnica de optimización adecuada para las situaciones cuando la función objetivo y las restricciones son funciones lineales.

#### Programación no-lineal

La programación no-lineal se refiere al conjunto de técnicas de optimización que se utilizan para resolver problemas de optimización en los cuales la función objetivo y/o las restricciones del problema incluyen términos no-lineales, lo cual es el caso más común en problemas en ingeniería de procesos. Existen dos tipos principales de métodos de programación no-lineal:

1. Métodos basados en gradiente: Un gradiente definido numéricamente es una buena herramienta de direccionamiento, ya que el gradiente se considera como un vector que siempre apunta en la dirección del incremento de una función en un espacio de búsqueda. Así, se puede utilizar esta propiedad del gradiente en la minimización de la función objetivo  $J$ . El procedimiento de la minimización del gradiente es bastante común por su simplicidad.
2. Métodos basados en búsqueda: Consiste en los siguientes pasos:
  - a) Mejor solución=solución actual.
  - b) Buscar  $n$  soluciones cercanas a la solución actual.
  - c) Si el valor de la función objetivo de la solución a verificar es menor al valor generado por la solución del paso (a), establecer mejor solución=solución evaluada.
  - d) Si la mejor solución=solución actual, finalizar el procedimiento.
  - e) Si no se cumple (c) o (d), regresar al paso 2.

Existen los métodos de búsqueda aleatoria y búsqueda dirigida:

- Búsqueda aleatoria: Esta propuesta se puede percibir como la técnica de "prueba y error" más directa, la cual utiliza el poder de cómputo disponible actualmente. Esta facilita el encontrar la solución de problemas de optimización discontinuos y continuos, restringidos y no restringidos, lineales y no-lineales. Su gran desventaja es la cantidad enorme de cálculos computacionales que hacen prohibitivo su aplicación en muchos casos.
- Búsqueda dirigida: La búsqueda directa es una alternativa más eficiente que la búsqueda aleatoria. En la búsqueda directa uno inicia de alguna condición inicial y sus pasos se basan en una expectativa razonable de éxito. Se desempeña bien para funciones restringidas y no restringidas, lineales y no-lineales, continuas y discontinuas. A pesar de que existen varios procedimientos de búsqueda directa que utilizan diferentes base para el "siguiente paso", uno de los más populares es el método Simplex de Nelder-Mead.

## Optimización genética

Los algoritmos de optimización genética poseen las ventajas de los métodos de optimización de búsqueda directa y aleatoria. Al combinarse con cómputo de alto desempeño son muy útiles para resolver problemas de optimización restringida no-lineal y multivariable. Se cree que estos algoritmos emulan los conceptos de los procesos de selección natural responsables de la perfección aparente del mundo natural.

## Programación dinámica

Muchos procesos se pueden considerar como una secuencia de etapas relativamente independientes pero interrelacionadas. Cada etapa o sub-proceso es relativamente independiente en el sentido que esta caracterizada por sus propias entradas, salidas, y criterios de optimización. Al mismo tiempo, las etapas individuales están inter-relacionadas: la salida de cada etapa, excepto en la última etapa, sirve como entrada a la etapa subsecuente. La programación dinámica es una técnica de optimización dirigida a la optimización de procesos multi-etapas. Este se basa en el principio fundamental de optimalidad de la programación dinámica formulada por Richard Bellman. El principio fundamental proporciona el marco para un procedimiento de optimización altamente eficiente y versátil de programación dinámica que trabaja en una base paso a paso y define los esfuerzos de control óptimos para las etapas individuales de procesos multi-etapas. Es importante que las decisiones de control hechas en cada paso del procedimiento no optimicen las etapas individuales del proceso, i.e. no resuelven problemas de optimización "local". En lugar, ellos optimizan la última porción del proceso entero que inicia en la etapa en cuestión y termina en la última etapa del proceso.

## 2.7. Control de Procesos

El objetivo principal a nivel industrial es de obtener un producto final terminado un proceso. Para llevar a cabo este objetivo se debe de implementar un sistema de control de procesos que se adapte a las necesidades de nuestro sistema. En esta sección se presentan conceptos generales para entender el control de procesos.

## 2.7.1. Definiciones

### Elementos básicos

Los elementos básicos de un sistema de control son:

1. Proceso o sistema a controlar: Es la unidad de proceso a controlar.
2. Sensores: Es el dispositivo que se utiliza para medir la variable a controlar.
3. Actuadores: Es el dispositivo que se utiliza para implementar la variable a manipular o entrada de control.
4. Perturbaciones: Son las variables que afectan la variable a controlar, pero que, a diferencia de la variable a manipular, no es posible o es complicado, modificar o mantenerla en valores convenientes para mantener la variable controlada en el valor deseado.
5. Punto de referencia: es el valor deseado de la variable a controlar.
6. Controlador: Es el algoritmo que calcula la entrada de control que se debe implementar en el proceso para llevar o mantener la variable a controlar en el valor deseado.

### Configuración retroalimentada

Consiste en la colocación de cada uno de los sistemas de control, como se muestra en la siguiente Figura (2-13).

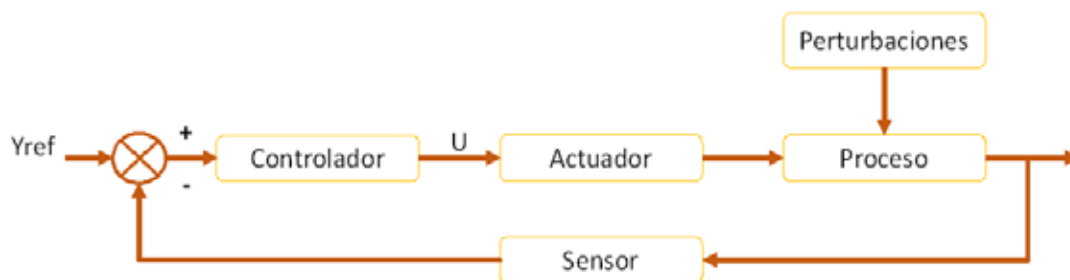


Figura 2-13: Esquema de control con retroalimentación y perturbaciones.

Esta configuración es la más usada, y tiene como características que lleva a cabo las acciones correctivas una vez que posibles perturbaciones afectan el valor deseado de la variable a controlar.



## Pasos para el diseño de sistemas de control

Los pasos generales para el diseño de un sistema de control son:

1. Definir el objetivo de control. Consiste en establecer cuál es la variable a manipular, la variable a controlar, y su valor deseado. Los objetivos de control se clasifican en dos tipos principales:
  - a) Regulación: Llevar la variable controlada a un valor constante.
  - b) Seguimiento: Llevar la variable controlada a una referencia que es una función del tiempo.
2. Selección de sensores y actuadores. Consiste en la selección de sensores y actuadores apropiados de acuerdo al objetivo de control que se establece en el paso 1. Los criterios generales para la selección de sensores y actuadores son precisión, potencia o velocidad de respuesta, y costos.
3. Modelar, analizar y simular el comportamiento de procesos. Consiste en mejorar el entendimiento del proceso a controlar, así como identificar el efecto de diferentes parámetros de operación. Este punto incluye lo siguiente:
  - a) Modelado: Formular el modelo dinámico que representa el proceso a partir de los principios de conservación.
  - b) Simulación: Resolver en forma numérica el modelo dinámico del proceso y evaluar diferentes escenarios de operación y diferentes condiciones iniciales.
  - c) Análisis matemático: Identificar puntos de operación posibles y sus propiedades.
4. Diseñar el controlador. Consiste en diseñar un controlador para el proceso a controlar a partir de alguna de las técnicas de control disponibles. En la literatura existen varios diseños de controladores, los cuáles varían por su complejidad y sus propiedades.
5. Implemetar y analizar el control a través de simulación numérica. Consiste en programar el algoritmo de control del paso 4 en la simulación numérica del proceso, y evaluar su comportamiento.

6. Implementar físicamente el esquema de control. Consiste en la implementación física final del sistema de control en el proceso real, e incluye la selección apropiada de sistemas de adquisición y transferencia de señales y del microprocesador para la programación del controlador.

### 2.7.2. Identificación empírica

La dificultad de formar modelos matemáticos que describen un proceso, así como los valores de los parámetros que están involucrados, conlleva generalmente a la solución de estas ecuaciones a través de métodos numéricos. Una alternativa para realizar modelos matemáticos para su resolución en problemas de control de procesos es la identificación empírica. La identificación empírica consiste en datos de respuesta cuando se tiene una perturbación de entrada.

Los modelos de un procesos se determinan haciendo cambios en las condiciones de entrada del proceso cercanos a las condiciones de operación base, los resultados que se obtienen se usan para realizar el modelo. Este proceso se realiza mediante una linealización y aplica siempre que se realice cerca de las condiciones de base. La desventaja de este método es que solo es válido para determinadas regiones. Los métodos de identificación empírica más conocidos son el método de curva de reacción y los métodos en base a principios estadísticos (Puebla 2010).

El proceso de curva de reacción se desarrolla en cuatro pasos:

1. Permitir que el proceso logre un estado estacionario.
2. Introducir un cambio escalón en la entrada de control.
3. Obtener los datos de la respuesta de salida hasta que el proceso logre un nuevo estado estacionario.
4. De acuerdo a la respuesta entrada-salida que se observa, elegir un modelo empírico. Los modelos empíricos del método de curva de reacción se restringen a tres modelos: de primer orden dado por la Ec. (2.18)

$$\tau_p \frac{dy}{dt} + y = k_p u \quad \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p s + 1} \quad (2.18)$$

de segundo orden dado por la Ec. (2.19),

$$\tau_p^2 \frac{d^2 y}{dt^2} + 2\xi\tau_p \frac{dy}{dt} + y = k_p u \quad \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p^2 s^2 + 2\xi\tau_p s + 1} \quad (2.19)$$

y de primer orden más tiempo muerto dado por la Ec. (2.20),

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p s + 1} \exp(-\tau_d s) \quad (2.20)$$

donde  $k_p$  es la ganancia en estado estacionario del proceso,  $\tau_p$  es la constante de tiempo del proceso,  $\xi$  es el coeficiente de amortiguamiento, y  $\tau_d$  es la constante de tiempo muerto.

5. Realizar los cálculos gráficos del proceso de curva de reacción.

### 2.7.3. Control clásico PID

Desde su introducción entre 1920-1930, el control clásico PID se usa en más del 90 % de aplicaciones industriales. El controlador PID tiene una estructura simple que funciona muy bien en muchos procesos químicos y biotecnológicos.

#### Controlador o algoritmo

Existen muchas variaciones pero la definición del algoritmo PID esta dada por la Ec. (2.21),

$$u(t) = k_c e(t) + \int_0^t e(t) dt + k_d \left[ \frac{de(t)}{dt} \right] \quad (2.21)$$

donde,

- $u(t)$  es la entrada de control.
- $y_{ref}(t)$  valor deseado de la variable a controlar.
- $y(t)$  es la medición de la variable a controlar.
- $e(t) = (y_{ref} - y(t))$  es el error de regulación.
- $k_c$  es la ganancia proporcional,  $k_i$  es la ganancia integral,  $k_d$  es la ganancia derivativa.

La versión del PID en función de transferencia esta dada por la Ec. (2.22),

$$u(s) = \left[ k_c + \frac{k_i}{s} + k_d s \right] e(t) \quad (2.22)$$

donde,

- $k_i = k_c / \tau_i$ , es la ganancia integral.
- $k_d = k_c \tau_d$ , es la ganancia derivativa.
- $\tau_i$  es la constante de tiempo integral.
- $\tau_d$  es la constante de tiempo derivativo.

El diseño de un controlador PID consiste en seleccionar las acciones de control apropiadas para una aplicación, y asignar los parámetros del controlador.

### Acciones del controlador PID

El control PID consiste de tres acciones en términos del error de regulación  $e(t)$ :

1. Proporcional: La cual proporciona un ajuste rápido de la variable a controlar y es muy sencilla de implementar. Sin embargo, es común que no se alcance la referencia deseada.
2. Integral: La cual garantiza que el error de regulación converge a cero  $e(t) \sim 0$ . La acción integral responde en forma lenta comparada con la acción proporcional y puede generar sobredisparos en la variable a controlar.
3. Derivativa: Permite acelerar la respuesta de las otras acciones de control. La acción derivativa no es fácil de implementar numéricamente cuando la variable a controlar cambia rápidamente.

Muchos de los procesos químicos y biotecnológicos se controlan en forma adecuada con el control PI.

Cuadro 2.1: Parámetros del método de sintonizado de Ziegler-Nichols

Controlador	$K_c$	$\tau_i$	$\tau_d$
P	$\frac{1}{\tau_l S}$		
PI	$\frac{0.9}{\tau_l S}$	$3.3\tau_l$	
PID	$\frac{1.2}{\tau_l S}$	$2.0\tau_l$	$\frac{\tau_l}{2}$

### Sintonizado del controlador.

La asignación de los parámetros del controlador se conoce como sintonizado. Existen muchos metodos de sintonizado del controlador PID. Dos de los más aceptados en control de procesos son el método de Ziegler-Nichols y las reglas propuestas por Skogestead basadas en el enfoque de control de modelo interno (IMC).

**Ziegler-Nichols** Se basa en los resultados de aplicar un cambio escalón en la variable a manipular a un proceso operando en estado estacionario, que es la base de la identificación empírica. A partir de la respuesta de la variable a controlar, se obtiene el incremento en las variables controlada y la entrada de control,  $\Delta Y$  y  $\Delta U$ . De la respuesta gráfica se obtiene la pendiente a través del punto de inflexión, normalizada por la magnitud  $\Delta U$ , es decir  $S = m/\Delta U$  y por su intersección con el eje  $x$  (tiempo), denotado como  $\tau_l$  en el valor base de  $y$ . Con esa información, se consultan las las relaciones de sintonizado en la Tabla 3.1.

**PID-IMC** Skogestead propuso un método de sintonizado con base a la formulación del control de modelo interno (IMC) y su analogía con el control PID. Para un proceso de primer orden con retardo dado por la Ec. (2.23),

$$G_p(s) = \frac{k_p}{\tau_0 s} \exp(-\tau_d s) \quad (2.23)$$

las reglas de sintonizado del control PI son (2.24):

$$\begin{aligned} k_c &= \frac{1}{k_p} \frac{\tau_0}{\tau_c + \tau_d} \\ \tau_i &= \min \{ \tau_0, 4(\tau_c + \tau_d) \} \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde  $\tau_c$  es una constante de tiempo con control que se puede elegir arbitrariamente. Una recomendación para una respuesta rápida con buenas propiedades de robustez es,  $\tau_c = \tau_d$ .

## 2.7.4. Control moderno

### Controlabilidad y observabilidad

La observabilidad y la controlabilidad describen el comportamiento de un sistema con el entorno tal como las entradas y salidas, además las variables internas como son los estados. La controlabilidad es una característica del sistema que indica la capacidad que tiene una señal de entrada para influir en la evolución del estado, es la propiedad que indica si un sistema puede ser controlado actuando desde sus entradas. Si se considera un sistema dado por la Ec. (2.25),

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du\end{aligned}\tag{2.25}$$

Un sistema es completamente controlable si los vectores  $B, AB, \dots, A^{n-1}B$  son linealmente independientes o la matriz de  $n \times n$  dada por (2.26)

$$Co = [B, AB, \dots, A^{n-1}B]\tag{2.26}$$

es de rango  $n$  o que el determinante de  $Co$  es diferente de cero.

La observabilidad es útil para resolver el problema de reconstrucción de variables de estado no medibles a partir de variables que sí los son en un tiempo mínimo posible. También puede definirse como la propiedad que indica si el comportamiento interno de un sistema puede detectarse desde la salida del mismo. Para un sistema de la forma (2.27),

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du\end{aligned}\tag{2.27}$$

el sistema es completamente observable si la matriz de  $nm \times n$  dada por (2.28),

$$Ob = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

es de rango  $n$  o presenta vectores columna linealmente independientes.

## Estimadores de estados

El control por retroalimentado de estados necesita que todos los estados estén disponibles para su retroalimentación. La retroalimentación de estados es (2.29),

$$\begin{aligned} u &= -kt \\ &= -k_1x_1 - k_2x_1 - \dots - k_nx_n \end{aligned} \quad (2.29)$$

En muchas ocasiones no se cuenta con la instrumentación para llevar a cabo las mediciones necesarias, ya que el costo de los sensores para este tipo de medición es muy elevado, o las señales son imprácticas de medir y en ocasiones existe ruido que interfiere con la medición. Entonces si un sistema tiene la propiedad de que es observable, es posible medir estados no medibles a través de un estimador u observador de estados.

Un observador es un sistema dinámico, que a partir de la entrada  $u$  y de la  $y$  del sistema genera un estimado de los estados no medibles. Para el sistema dado por la Ec. (2.30),

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned} \quad (2.30)$$

un observador de estados esta dado por la Ec. (2.31),

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} = A\tilde{x} + Bu + L(y - C\tilde{x}) \quad (2.31)$$

$L$  es una matriz de observación, y  $\tilde{x}$  es un estimado del estados  $x$ .

## 2.8. Incertidumbre y robustez

### 2.8.1. Incertidumbre

Las incertidumbres están definidas como la falta de confianza de algún resultado o bien cuando se desconoce el tipo de resultado que se obtendrá en una determinada situación. Las incertidumbres pueden deberse a varios factores como la falta de información, los constantes cambios que se presentan sobre un tema en específico, ignorancia o incluso a fenómenos físicos. La incertidumbre es considerada un concepto abstracto, sin embargo puede cuantificarse con las mediciones correspondientes (Zhang et al. 2018). Las incertidumbres en un modelo se refieren a los datos que no se consideran para la resolución del mismo, como los valores de los parámetros o la validez del modelo en determinadas regiones, generalmente la incertidumbres de implementación se pueden dar cuando se presenta una falla de escalamiento de una planta piloto o industrial (Torres, 2017).

### 2.8.2. Robustez

La robustez se usa como un parámetro para el análisis y diseño de sistemas de control con mayor estabilidad robusta. La robustez en general es la máxima variación que pueden tener los parámetros inciertos antes de que el sistema se vuelva inestable (Ortiz, 2005).

## 2.9. Control robusto por compensación de error de modelado

El diseño de control por compensación de error de modelado, es un diseño de control que se basa basado en un modelo del proceso a controlar y toma en cuenta posibles fuentes de incertidumbre en el modelo. El diseño de control consiste en los siguiente. Se considera un modelo general del proceso a controlar de la forma dada por la Ec. (2.32),

$$\frac{dy}{dt} = f(x, y) + g(x, y)u \quad (2.32)$$

En donde  $y$  es el estado o la variable a controlar, y la  $x$  son los estados o variables no controladas.

Para fines de control, se considera que las funciones  $f(y, x)$  y  $g(y, x)$  contiene parámetros



inciertos (parámetros de transporte o constantes cinéticas) o contiene términos completos que no se conocen con precisión (cinéticas). Además, se considera que se tiene un estimado de las incertidumbres que afectan a la entrada de control, representado por (2.33),

$$g(y, x) = \bar{g}(y, x) \quad (2.33)$$

Un primer paso en el diseño de control basado en modelo, es el control ideal, el cual está dado por la Ec. (2.34),

$$u(t) = \bar{g}(y, x)^{-1} \left[ -f(y, x) - \tau_c^{-1} e + \frac{dyref}{dt} \right] \quad (2.34)$$

al implementar el controlado anterior en el proceso a controlar, se obtiene el sistema con control dado por (2.35),

$$\frac{de(t)}{dt} = -\tau_c^{-1} e(t) \quad (2.35)$$

lo cual garantiza que  $e(t)$  converge a cero.

La ley de control anterior no se puede implementar debido a las consideraciones que se mencionaron al inicio, es decir las incertidumbres o desconocimiento de  $f(y, x)$ . Con la finalidad de considerar incertidumbres en  $f(y, x)$  en el diseño de control, se introduce un estimador u observador de estados para obtener un estimado de este término a partir del modelo base del proceso, de las mediciones disponibles y de la entrada de control. Los pasos son los siguientes:

1. Agrupar las incertidumbres en un nuevo estado:

$$\eta(t) = f(y, x) \quad (2.36)$$

de forma que el modelo con incertidumbres está dado por la Ec. (2.37),

$$\frac{dy(t)}{dt} = \eta(t) + \bar{g}(y, x)u(t) \quad (2.37)$$

donde  $\eta(t)$  son todas las incertidumbres que el modo pueda tener.

2. Se introduce un estimador de estados para poder conocer el valor de  $\eta(t)$ , de la siguiente

manera (2.38),

$$\frac{d\bar{\eta}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta(t) - \bar{\eta}(t)) \quad (2.38)$$

donde  $\tau_e$  es una constante del tiempo de estimación.

3. El estimador anterior se puede re-escribir al usar la Ec. (2.39),

$$\eta(t) = \frac{dy(t)}{dt} - \bar{g}(y, x)u(t) \quad (2.39)$$

de modo que se obtiene la Ec. (2.40),

$$\frac{d\bar{\eta}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}\left(\frac{dy(t)}{dt} - \bar{g}(y, x)u(t) - \bar{\eta}(t)\right) \quad (2.40)$$

4. Para poder implementar el estimador anterior se re-escribe de la siguiente forma (2.41),

$$\tau_e \frac{d\bar{\eta}(t)}{dt} - \frac{dy(t)}{dt} = -\bar{g}(y, x)u(t) - \bar{\eta}(t) \quad (2.41)$$

y se introduce la variable dada por (2.42),

$$w(t) = \tau_e \bar{\eta}(t) - y(t) \quad (2.42)$$

de forma que el estimador se puede escribir de acuerdo a la Ec. (2.43),

$$\begin{aligned} \frac{dw(t)}{dt} &= -\bar{g}(y, x)u(t) - \frac{w(t) + y(t)}{\tau_e} \\ \bar{\eta}(t) &= \frac{w(t) + y(t)}{\tau_e} \end{aligned} \quad (2.43)$$

de modo que el estimador (2.43) permite obtener en forma continua el estimado de las incertidumbres agrupadas del modelo.

5. El control considerando las incertidumbres está dado por la Ec. (2.44),

$$u(t) = -\bar{g}(y, x)^{-1} [\bar{\eta}(t) + \tau_c^{-1}e] \quad (2.44)$$

donde  $\tau_c$  es la constante de tiempo a lazo cerrado.

6. El controlador resultante dado por el controlados (2.44) y el estimador (2.43), solo depende del estimado  $\bar{g}(y, x)$ , de  $y(t)$ , y de los parámetros de diseño del controlador y estimador,  $\tau_c$  y  $\tau_e$ . Un estimado de ellos esta dado por la siguiente regla (2.45),

$$\tau_0 > \tau_c > \tau_e \quad (2.45)$$

donde  $\tau_0$  es una constante de tiempo dominante del proceso a controlar (e.g. el tiempo de residencia).

# Capítulo 3

## Casos de Estudio

En este Capítulo se describen las características de los dos casos de estudio. Se incluye el modelado de cada caso de estudio, las simulaciones numéricas bajo diferentes escenarios, y el análisis de los puntos de equilibrio y su estabilidad.

### 3.1. Fotofermentación anaerobia de hidrógeno en un CSTR

#### 3.1.1. Descripción del proceso

El proceso de fermentación es un proceso bioquímico por el cual se degrada materia orgánica compleja, generalmente en materia más simple en condiciones anaerobias, debido a esto la producción de hidrógeno a partir de este método es viable ya que es sostenible y barata en procesos fermentativos, durante la combustión del hidrógeno se produce en su mayoría agua y presenta un alto rendimiento energético.

El proceso de fotofermentación se lleva a cabo mediante bacterias fotosintéticas, usando luz y compuestos reducidos, generalmente compuestos orgánicos que se encuentran en materia de desecho, además de que para el proceso se requiere condiciones pobres de nitrógeno para así llevar a cabo la producción de hidrógeno (Bedoya et al. 2008).

Una desventaja que presenta este método es que la variación de la intensidad luminosa, ya que su incremento se ve directamente relacionado con la velocidad de producción y el rendimiento del hidrógeno (Hillmer y Gest 1977), (Kaptan y Kargi 2006).

Del mismo modo la fermentación oscura se lleva a cabo con microorganismos que mediante

la degradación de sustratos complejos generan hidrógeno ya que su estructura de dichos microorganismos es lignocelulósica.

### 3.1.2. Fotofermentación en un CSTR

Se tiene un reactor continuo de tanque agitado en el cual se almacena el microorganismo *Rhodobacter capsulatus* ( $X$ ). Al reactor se le suministra un flujo volumétrico ( $Q$ ) el cual tiene un sustrato ( $S_{in}$ ) que al entrar en contacto con los microorganismos y con ayuda de la intensidad luminosa, es procesado generando hidrógeno, obteniendo así el flujo de salida compuesto por el sustrato que no se consume ( $S$ ), biomasa ( $X$ ) e hidrógeno ( $H_2$ ). Se considera un volumen de mezcla reactante constante y una temperatura de operación también constante.

Se considera un proceso continuo de foto-fermentación de hidrógeno en un reactor continuo de tanque agitado isotérmico, como se muestra en la Figura (3-1).

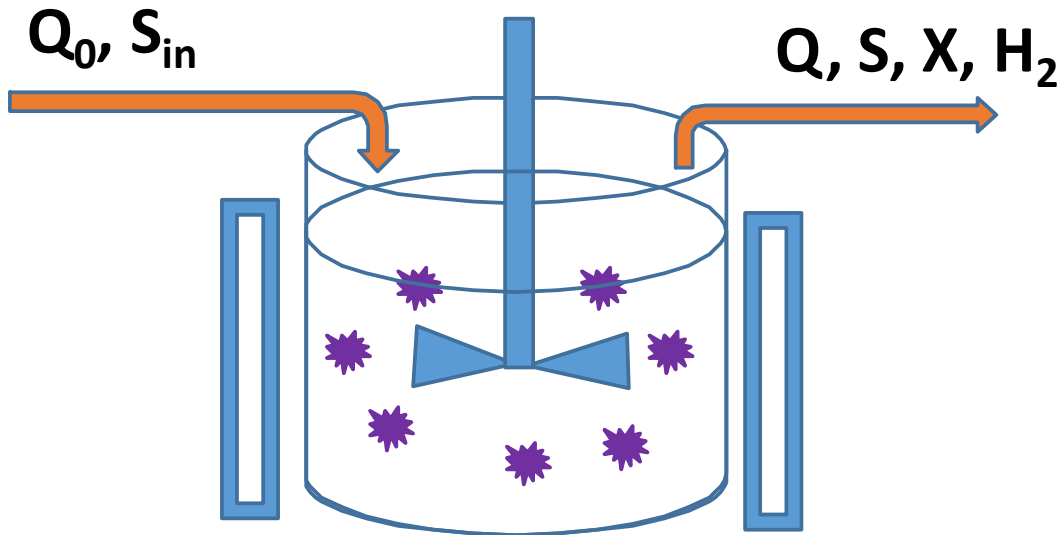


Figura 3-1: Foto-fermentador continuo para producción de  $H_2$ .

### 3.1.3. Modelo Matemático

El modelo matemático se toma de la literatura y toma en cuenta las siguientes consideraciones:

- La carga orgánica de entrada se considera de un solo tipo, agrupada en el sustrato,  $S$ .

- Los microorganismos se consideran de un solo tipo, *Rhodobacter capsulatus*, representada por  $X$ .
- El hidrógeno se produce por la acción combinada de las bacterias y la intensidad de la luz. Se modela por una expresión tipo Luedeking-Piret, el cual considera que el producto del metabolismo se debe al crecimiento celular, y a la cantidad presente de microorganismos.
- La cinética de crecimiento de microorganismos es del tipo Monod. Es decir, no se consideran efectos de inhibición.

El balance de materia para el sustrato esta dad por la Ec. (3.1),

$$\frac{dS}{dt} = D(S_{in} - S) - \frac{1}{Y_{X/S}} \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X \quad (3.1)$$

representado por la acumulación del mismo seguido de la entrada menos la salida del mismo menos el término de consumo, donde  $S$  ( $g/L$ ) representa el sustrato,  $S_{in}$  ( $g/L$ ) sustrato de entrada,  $D$  (1/h) es la velocidad de dilución,  $Y_{x/s}$  ( $gX/gS$ ) el coeficiente de productividad de biomasa por consumo de sustrato,  $\mu_{MAX}$  (1/h) constante de crecimiento máximo,  $K_S$  ( $g/L$ ) constante de saturación y  $X$  ( $g/L$ ) los microorganismos.

El balance para los microorganismos o biomasa  $X$  esta dado por la Ec. (3.2),

$$\frac{dX}{dt} = -DX + \frac{\mu_{MAX}}{K_S + S} X \quad (3.2)$$

el cual considera la salida de biomasa, y su crecimiento de acuerdo a la cinética de Monod.

El balance de masa para el hidrógeno esta dado por la Ec. (3.3),

$$\frac{dH_2}{dt} = -DH_2 + \frac{1}{Y_{X/H}} \phi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (3.3)$$

que considera la salida de hidrógeno, y la producción de hidrógeno asociada al crecimiento de biomasa y a la cantidad de biomasa disponible.  $Y_{x/H_2}$  ( $gX/ mL * L$ ) es el coeficiente productividad de hidrógeno por el consumo de biomasa,  $\phi(I)$  es la intensidad luminosa y  $\delta$  ( $mL * L/gX * h$ ) es la constante de producción de  $H_2$  asociada a la concentración de biomasa,  $X$ . Donde los  $mL$  corresponden a la producción de  $H_2$ , y los  $gX/L$  a la concentración de biomasa.

### 3.1.4. Simulaciones Numéricas

El sistema a resolver consiste en tres ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales dadas por las Ec. (3.1-3.3), las cuales se programan en Matlab. La rutina que se utiliza es Runge-Kutta, que permite la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales y permite un error numérico pequeño comparado con el método de Euler. El código del programa se presenta en la sección de Apéndices.

Para las simulaciones numéricas base se usaron los parámetros reportados en Pérez et al. (2015):  $\mu_{MAX} = 0,4h^{-1}$ ,  $k_S = 10 \text{ g/L}$ ,  $Y_{x/s} = 0,7 \text{ g}_x/\text{g}_s$ ,  $Y_{x/H_2} = 1 \text{ g}_x/\text{g}_{H_2}$  y  $\gamma = \phi(I)/Y_{x/H_2} = 5$ .

La Figura (3-2) presenta los perfiles de los tres estados para tres escenarios: (i) Simulación con parámetros base (línea roja). (ii) Simulación con un incremento de la dilución del 20 % (línea verde). (iii) Simulación con un incremento de la carga orgánica del 20 % (línea azul).

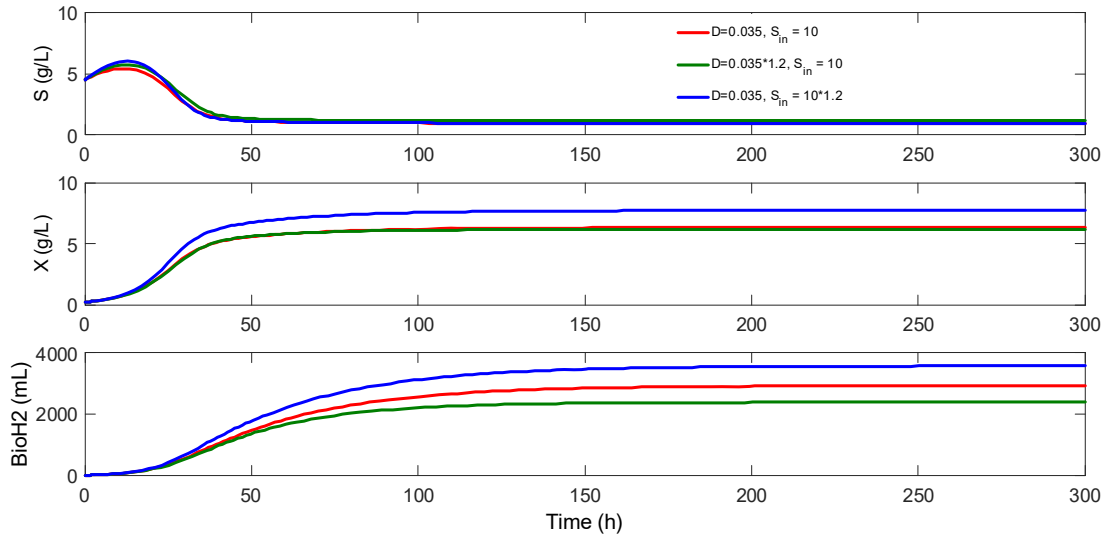


Figura 3-2: Efecto de cambios en el sustrato de entrada.

Se puede observar en la Figura (3-2) que la simulación base conduce a una operación en estado estacionario de alrededor de 2900 mL de  $H_2$  en fase gas. Al incrementar la dilución se observa una disminución en la producción de  $H_2$  asociado a un menor tiempo para su producción a partir de la biomasa. Por otro lado, al incrementar la carga orgánica, se observa un incremento en la biomasa y en el  $H_2$ , debido a la mayor disponibilidad de alimento y una mayor concentración de biomasa.

Con la finalidad de evaluar la presencia de diferentes puntos de operación, se llevaron a cabo simulaciones a diferentes condiciones iniciales. La Figura (3-3) presenta los resultados.

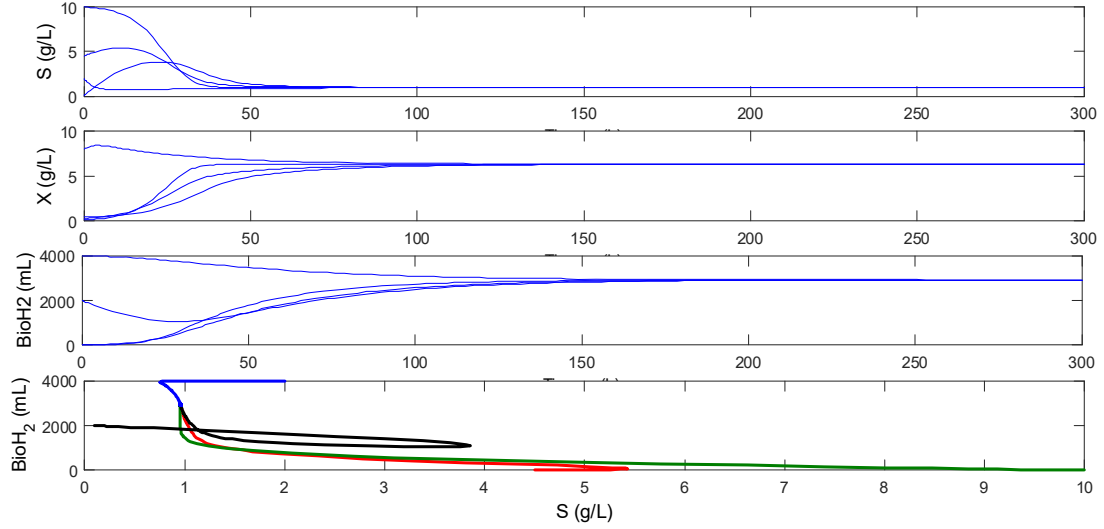


Figura 3-3: Efecto de diferentes condiciones iniciales en la simulación base.

Se puede observar que partiendo de las diferentes condiciones iniciales se converge al mismo punto de operación, que indica que es posible que solo exista un punto de operación estable.

### 3.1.5. Análisis Matemático

Para explorar formalmente la existencia de puntos de operación posibles, se determinan los puntos de equilibrio. El sistema a resolver consiste en las ecuaciones del modelo en estado estacionario dadas por las Ecs. (3.4-3.6),

$$0 = D(S_{in} - S) + \frac{1}{Y_{\frac{X}{S}}} \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X \quad (3.4)$$

$$0 = -DX + \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X \quad (3.5)$$

$$0 = -DH_2 + \frac{1}{Y_{\frac{X}{H}}} \phi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (3.6)$$



Cuadro 3.1: Puntos de equilibrio del modelo de foto-fermentación.

Estado	PE <sub>1</sub>	PE <sub>2</sub>	PE <sub>3</sub>	PE <sub>4</sub>	PE <sub>5</sub>
S*(g/L)	10	-10	-10	0.9589	-10
X*(g/L)	0	0	0	6.3287	0
Bio-H <sub>2</sub> (mL)	0	0	2924.8	2924.8	Imaginario
Interpretación	Lavado	No factible	No factible	Factible	No factible

Cuadro 3.2: Valores propios de dos puntos de equilibrio del modelo de foto-fermentación.

PE	Lambda 1	Lambda 2	Lambda 3	Lambda 4
1	-0.0350	0.1650	-0.0350	Inestable
4	-0.0350	-0.0350	-0.3011	Estable

El cual es un sistema algebraico de ecuaciones no-lineales que se puede resolver por métodos de búsqueda de raíces, por ejemplo el Newton-Raphson. Utilizando los comandos de Matlab solve y fsolve, la Tabla 3.1, presenta los resultados.

Para analizar la estabilidad de los puntos de equilibrio factibles, P1 y P4, se lleva a cabo la linealización del modelo no-lineal original (3.1-3.3) y se evalúan los valores propios de cada punto de equilibrio. El modelo lineal resultante aplicando el jacobiano esta dad por las Ecs. (3.7-3.8).

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_3} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4x_1x_2}{7(x_1+10)^2} - \frac{4x_2}{7(x_1+10)} - u, & -\frac{4x_1}{7(x_1+10)}, & 0 \\ \frac{2x_2}{5(x_1+10)} - \frac{2x_1x_2}{5(x_1+10)} & \frac{2x_1}{5(x_1+10)} - u & 0 \\ \frac{2x_2}{x_1+10} - \frac{2x_1x_2}{(x_1+10)^2} & \frac{2x_1}{x_1+10} + 16 & -u \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u} \\ \frac{\partial f_3}{\partial u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 - x_1 \\ -x_2 \\ -x_3 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Al evaluar los valores propios se obtienen los resultados de la Tabla 3.2.

Se puede observar que, el PE 4, que corresponde a los resultados de simulación numérica, esta asociado el unico PE estable factible del modelo del CSTR para foto-fermentación de hidrógeno.

## 3.2. Fermentación Oscura de Hidrógeno en un CSTR

### 3.2.1. Descripción

La fermentación oscura es uno de los métodos más importantes para producción de hidrógeno por métodos biológicos ya que utiliza como materia prima fuentes renovables como la materia orgánica que mediante la intervención de microorganismos se genera dicha fuente de energía. En particular, existe una variedad de vías fermentativas en la fermentación oscura. La producción de hidrógeno a través de la fermentación oscura es un proceso muy complejo e influido por muchos factores, incluidos el sustrato, el tipo de reactor y el tiempo de retención hidráulica. En el caso de la glucosa como sustrato, se convierte en piruvato por bacterias productoras de hidrógeno, con una producción de NADH. El piruvato se convierte luego en acetil-coenzima A (acetil-CoA), dióxido de carbono e hidrógeno por acción de piruvato-ferredoxina oxidorreductasa y enzimas hidrogenasas (Kalinci et al. 2009; Arimi et al. 2015).

La fermentación oscura se ha llevado a cabo tanto en modo de operación discontinua como continua (Kalinci et al. 2009; Arimi et al. 2015). Sin embargo, la operación continua y anaerobia es preferible debido a su mayor producción a largo plazo y mejor control de calidad (Chang et al. 2002; Aceves-Lara et al. 2010).

La operación convencional de reactores biológicos está sujeta a importantes perturbaciones internas y externas. Por ejemplo, cambios en la carga orgánica del sustrato, la actividad microbiana y las condiciones ambientales. Por lo tanto, la producción de proceso hidrógeno a través de la fermentación oscura podría mejorarse mediante la introducción de esquemas de control que garanticen la operación del proceso en una condición óptima dada (Aceves-Lara et al. 2010; Nath y Das, 2011).

La producción de hidrógeno por fermentación oscura se obtiene a partir de la ruta metabólica que se muestra en la Figura (??).

Los pasos principales de la ruta metabólica son los siguientes:

- La glucosa se convierte por medio de bacterias productoras de hidrógeno a piruvato.
- El piruvato se oxida por medio de enzimas piruvato ferredoxin oxidorreductasa e hidrogenasa para producir acetyl- coenzyma A (acetyl- CoA), dióxido de carbono e hidrógeno.



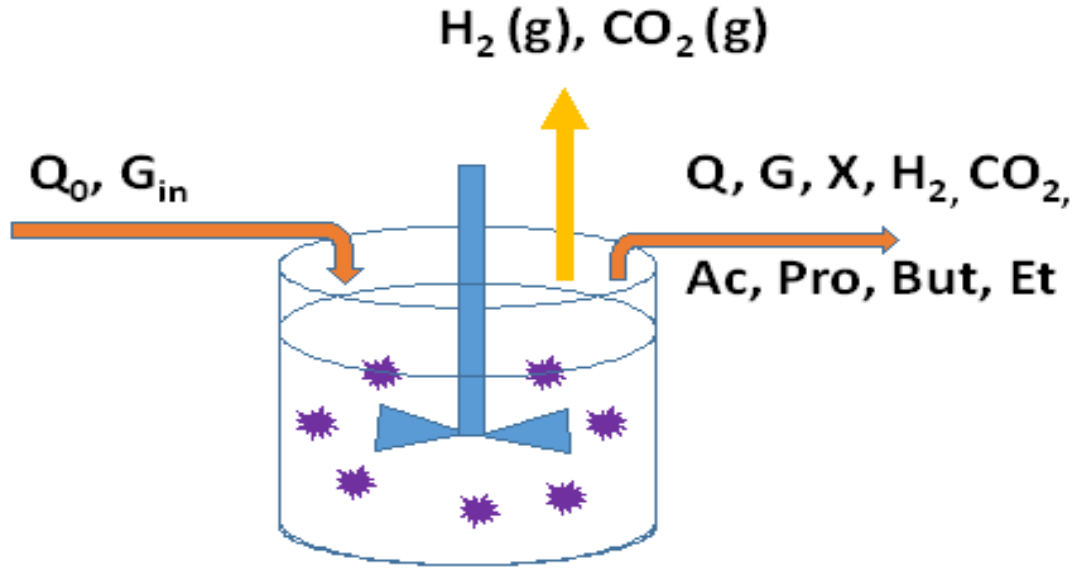


Figura 3-5: Reactor continuo de tanque agitado para fermentación oscura de hidrógeno.

- Las reacciones se describen usando la aproximación pseudo-estequiométrica propuesta por Aceves-Lara et al. (2008), ya que es un caso que se ha trabajado con control.
- El  $H_2$  y el  $CO_2$  en fase líquida se encuentran en equilibrio con su fase gas.
- Se consideran 10 especies principales.

El modelo matemático se obtiene a partir de balances de materia sobre 10 especies, descritos por las Ecs. (3.9-3.18),

$$\frac{dG}{dt} = D(G_{in} - G) - \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.9)$$

$$\frac{dAc}{dt} = -DAc + 0,3238 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.10)$$

$$\frac{dPro}{dt} = -DPro + 0,0205 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - 0,0174 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.11)$$

$$\frac{dBut}{dt} = -DBut + 0,3028 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,2737 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.12)$$

$$\frac{dEt}{dt} = -DEt + 0,0242 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,0219 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.13)$$

$$\frac{dX}{dt} = -DX + 0,0829 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,1068 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.14)$$

$$\frac{dCO_2}{dt} = -DCO_2 + 0,0049 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,0087 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X - k_{LaCO_2}(CO_2 - K_{H,CO_2}PCO_{2,gas}) \quad (3.15)$$

$$\frac{dH_2}{dt} = -DH_2 + 0,0351 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}PH_{2,gas}) \quad (3.16)$$

$$\frac{dCO_{2,gas}}{dt} = -\frac{Q_{gas}}{V_{gas}}CO_{2,gas} + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaCO_2}(CO_2 - K_{H,CO_2}PCO_{2,gas}) \quad (3.17)$$

$$\frac{dH_{2,gas}}{dt} = -\frac{Q_{gas}}{V_{gas}}H_{2,gas} + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}PH_{2,gas}) \quad (3.18)$$

donde,

$$Q_{gas} = q_{CO_2} + q_{H_2} \quad (3.19)$$

$$q_{CO_2} = \frac{RT_{amb}V}{P_{amb} - P_{vap,H_2}}k_{LaCO_2}(CO_2 - K_{H,CO_2}PCO_{2,gas}) \quad (3.20)$$

$$q_{H_2} = \frac{RT_{amb}V}{P_{amb} - P_{vap,H_2}} \frac{k_{LaH_2}}{M_{H_2}}(H_2 - K_{H,H_2}PH_{2,gas}) \quad (3.21)$$

$$P_{H_2,gas} = \frac{H_{2,G}RT}{M_{H_2}} \quad (3.22)$$

Son los flujos de gas total (3.19), de gas de dióxido de carbono (3.20), de gas hidrógeno (3.21), y la presión parcial de  $H_2$  (3.22).

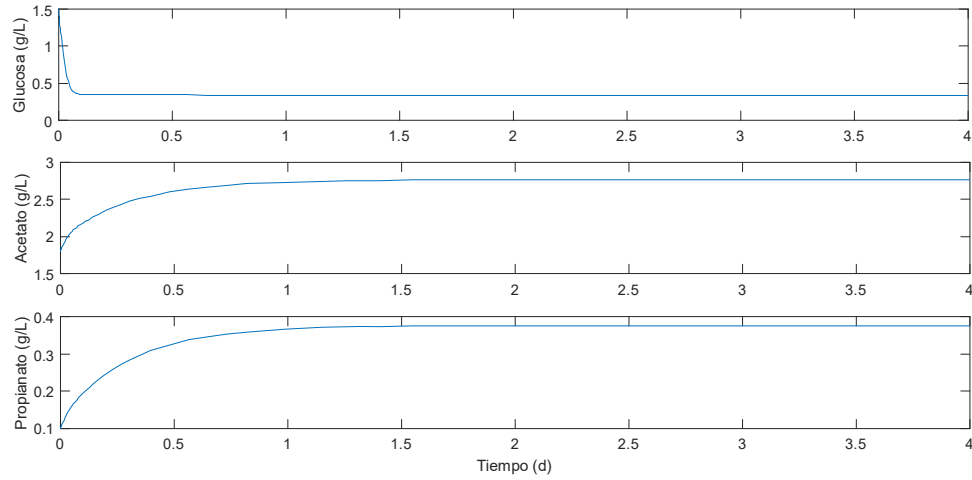


Figura 3-6: Comportamiento dinámico de la glucosa, acetato y propianato en un CSTR de fermentación oscura.

### 3.2.3. Simulación Numérica

El modelo anterior se programó en Matlab. El código se presenta en la Sección de Apéndices. Las Figuras (3-6-3-8) presentan los resultados de la simulación base con los parámetros reportados por Zúñiga et al. (2015):  $Q = 3 \text{ L/d}$ ,  $G_{in} = 20 \text{ g/L}$ ,  $\mu_{max1} = 37,3197$ ,  $k_{s1} = 0,2896$ ,  $\mu_{max2} = 27,2416$ ,  $k_{s2} = 9,2596$ ,  $V = 0,9 \text{ L}$ ,  $V_G = 0,35 \text{ L}$ ,  $k_L = 3065 \text{ d}^{-1}$ ,  $M_{H_2} = 2,016 \text{ g/mol}$ ,  $K_{H_2} = 7,38 \times 10^{-4} \text{ mol/L} \bullet \text{ bar}$ ,  $R = 8,314 \times 10^{-2} \text{ bar} \bullet \text{ L/mol} \bullet \text{ K}$ ,  $T = 308 \text{ K}$ .

De la simulación base de operación se puede observar el consumo de la Glucosa de entrada y la producción de los productos principales de la ruta metabólica, Acetato, Propianato, Butirato, Etanol, así como un incremento de la biomasa. Para el valor nominal de  $Q = 3 \text{ L/d}$ , se observa una producción en estado estacionario de  $15 \text{ L/d}$  de hidrógeno. Por otro lado, la glucosa de entrada de  $20 \text{ g/L}$ , se consume en alrededor de un 95%.

Para verificar si existe más de un punto de operación con los parámetros base se varían las condiciones iniciales en tres regiones. La Figura (3-9) presenta los resultados.

Con diferentes condiciones iniciales, se puede observar como en todos los casos se converge a un mismo punto, lo que significa que el CSTR presenta un solo punto de equilibrio.

Por otro lado, considerando cambios en la dilución, el efecto en las variables del modelo se presenta en Figura (??).

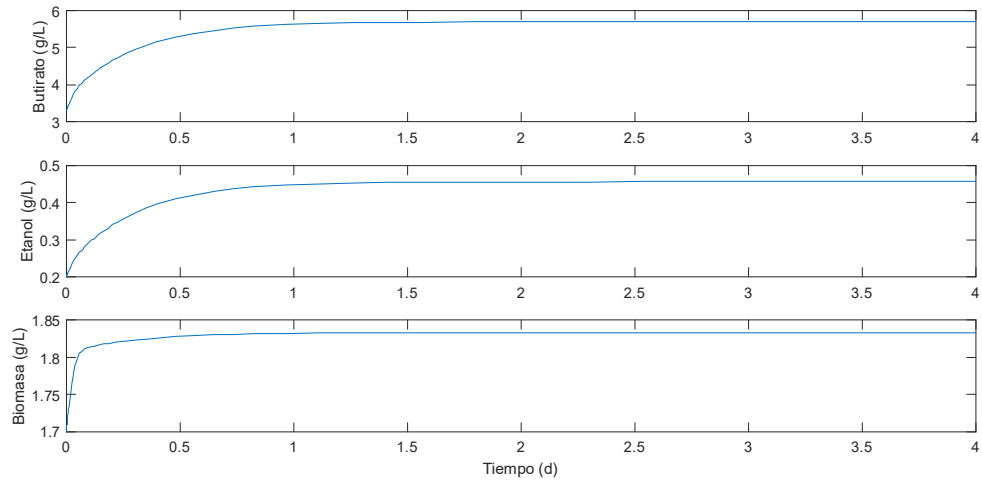


Figura 3-7: Comportamiento dinámico del butirato, etanol y biomasa en un CSTR de fermentación oscura.

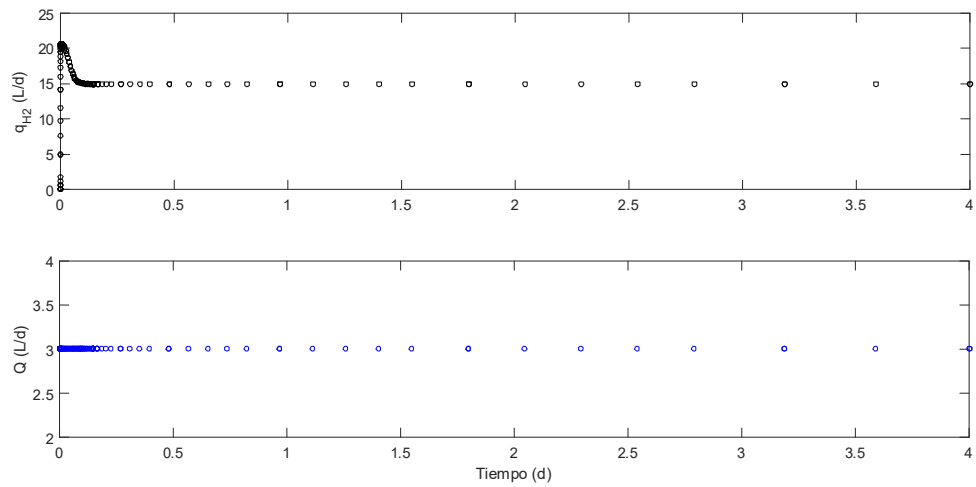


Figura 3-8: Comportamiento dinámico del flujo de hidrógeno para el valor nominal de flujo volumétrico  $Q = 3$  L/d en un CSTR de fermentación oscura.

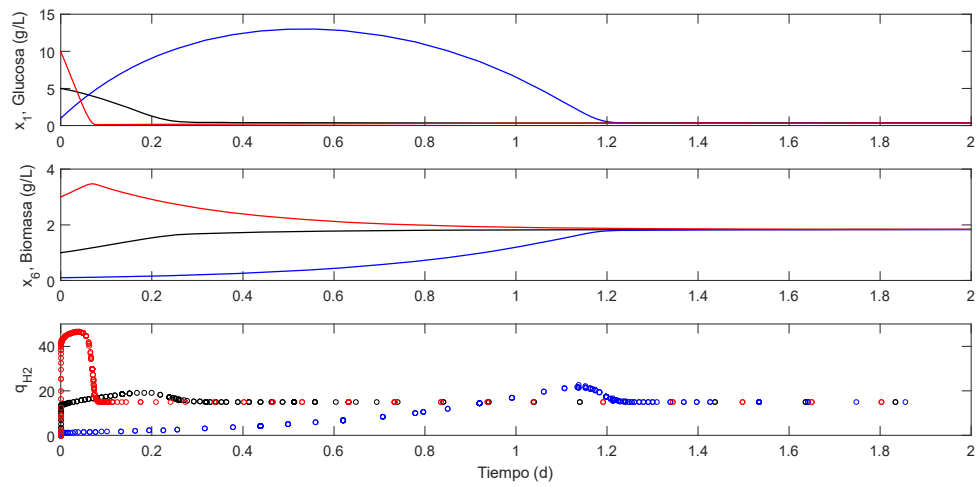


Figura 3-9: Efecto de las condiciones iniciales en el modelo de fermentación oscura.

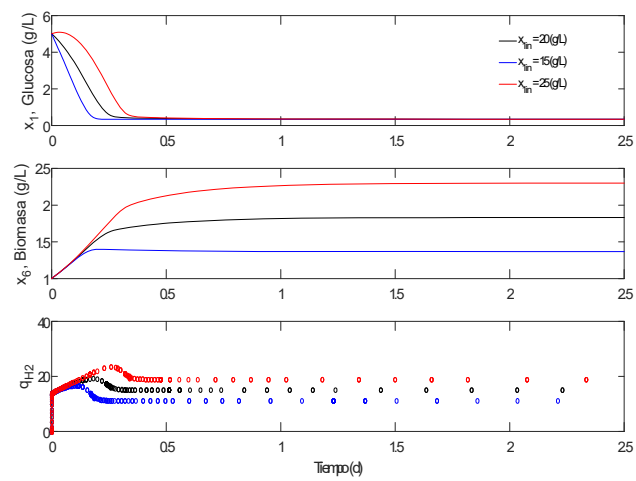


Figura 3-10: Efecto de la glucosa de entrada en la simulación numérica del modelo de fermentación oscura.



Se puede observar que al incrementar la velocidad de dilución el hidrógeno también se incrementa y cuando es pequeña el hidrógeno disminuye.

La Figura (3-10) muestra los resultados del efecto de cambios en la glucosa de alimentación. Al incrementar la cantidad de glucosa en la entrada se incrementa la cantidad de hidrógeno que se produce y al disminuirla se genera menos cantidad de hidrógeno.

### 3.2.4. Análisis Matemático

Con la finalidad de facilitar el manejo matemático del cálculo de puntos de equilibrio y la linealización, se considera un modelo simplificado de solo 4 especies: la glucosa  $G$ , la biomasa  $X$ , el hidrógeno en fase líquida  $H_2$ , y el hidrógeno en fase gas  $H_{2gas}$ . El modelo reducido se ha usado por diversos autores en estudios de control. El modelo resultante esta dado por las Ecs. (3.23-3.26):

$$\frac{dG}{dt} = D(G_{in} - G) - \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.23)$$

$$\frac{dX}{dt} = -DX + 0,0829\frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,1068\frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \quad (3.24)$$

$$\frac{dH_2}{dt} = -DH_2 + 0,0351\frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}P_{H_2,gas}) \quad (3.25)$$

$$\frac{dH_{2gas}}{dt} = -\frac{q_{H_2}}{V_{gas}}H_{2gas} + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}P_{H_2,gas}) \quad (3.26)$$

donde,

$$q_{H_2} = \frac{RT_{amb}V}{P_{amb} - P_{vap,H_2}} \frac{k_{LaH_2}}{M_{H_2}}(H_2 - K_{H,H_2}P_{H_2,gas}) \quad (3.27)$$

Entonces, el modelo para fines de análisis de puntos de equilibrio esta dado por la Ec.

(3.28):

$$\begin{aligned}
0 &= D(G_{in} - G) - \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \\
0 &= -DX + 0,0829\frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,1068\frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X \\
0 &= -DH_2 + 0,0351\frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2PH_2,gas}) \\
0 &= -\frac{1}{V_{gas}}H_{2gas}\left(\frac{RT_{amb}V}{P_{amb} - P_{vap,H_2}}\frac{k_{LaH_2}}{M_{H_2}}(H_2 - K_{H,H_2PH_2,gas})\right) + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2PH_2,gas})
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Utilizando la función fsolve en Matlab, con la condición de búsqueda ( $G = 1,5$ ,  $X = 0,5$ ,  $H_2 = 0,1$ ,  $H_{2gas} = 0,1$ ), se obtiene el punto de equilibrio que corresponde a la simulación numérica, es decir:  $G = 0,3430$  g/L,  $X = 1,8334$  g/L,  $H_2 = 0,019$  g/L,  $H_{2gas} = 0,0779$  g/L.

La linealización en el PE esta dada por las Ecs. (3.29) y (3.30),

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} & \frac{\partial f_1}{\partial x_4} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} & \frac{\partial f_2}{\partial x_4} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3} & \frac{\partial f_3}{\partial x_4} \\ \frac{\partial f_4}{\partial x_1} & \frac{\partial f_4}{\partial x_2} & \frac{\partial f_4}{\partial x_3} & \frac{\partial f_4}{\partial x_4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -88,6 & -35,7 & 0 & 0 \\ 7,9 & 0 & 0 & 0 \\ 1,7 & 0,7 & -3068,3 & 57,9 \\ 0 & 0 & 0 & -42,8 \end{bmatrix} \tag{3.29}$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u} \\ \frac{\partial f_3}{\partial u} \\ \frac{\partial f_4}{\partial u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21,84 \\ -2,0371 \\ -0,0021 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.30}$$

Al evaluar los valores propios de la matriz A (3.29) se obtienen,  $\lambda_1 = -85,2$ ,  $\lambda_2 = -3,3$ ,  $\lambda_3 = -3068,3$ ,  $\lambda_4 = -42,8$ , que corresponde a un PE estable.

# Capítulo 4

## Optimización de la Producción de Hidrógeno

En este Capítulo se presenta la formulación y solución del problema de optimización de cada caso de estudio. Se establece la función objetivo, las restricciones y el método de solución.

### 4.1. Foto-fermentación

Para la foto-fermentación se consideran dos problemas de optimización: (i) La minimización del substrato de salida. (ii) La maximización del  $H_2$ .

#### 4.1.1. Función objetivo

La función objetivo del primer caso esta representada por la Ec. (4.1):

$$\text{mín } J = \left(1 - \frac{S_{in} - S}{S_{in}}\right)^2 \quad (4.1)$$

y la función objetivo del segundo problema esta representada por la ecuación (4.2):

$$\text{mín } J = -H_2 \quad (4.2)$$

Cuadro 4.1: Resultados de la optimización del modelo de foto-fermentación.

Estado	Sim. Base	PO1	PO2
$S(\text{g/L})$	0.9589	0.389	0.389
$X(\text{g/L})$	6.3287	6.727	6.727
$H_2(\text{mL})$	2924.8	7209	7209
Dilucion(1/h)	0.035	0.015	0.015

#### 4.1.2. Restricciones

Las restricciones son de la ecuación (4.3-4.7):

$$0 = D(S_{in} - S) + \frac{1}{Y_{\frac{X}{S}}} \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X \quad (4.3)$$

$$0 = -DX + \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X \quad (4.4)$$

$$0 = -DH_2 + \frac{1}{Y_{\frac{X}{H}}} \varphi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (4.5)$$

$$S \leq S_{in} \quad (4.6)$$

$$D_{min} \leq D \leq D_{lavado} \quad (4.7)$$

Las tres primeras restricciones corresponden al cumplimiento de balances de materia en estado estacionario. La cuarta restricción al límite máximo de substrato en el reactor, y la última restricción a un mínimo de dilución, además del límite máximo de dilución para evitar la condición de lavado, lo que significa que la dilución es muy alta y los microorganismos son arrastrados fuera del reactor.

#### 4.1.3. Resultados

El problema de optimización resultante es tipo programación no-lineal y se resuelve usando Matlab. Los resultados se presentan en la Tabla 4.1.

Se puede observar que en ambos problemas de optimización se alcanza el valor mínimo de la

dilución para minizar la carga organica de salida y maximizar la producción de hidrógeno, lo cual esta asociado a tener un mayor tiempo de residencia en el reactor que permite un mayor consumo de subtrato y un incremento en la producción de hidrógeno.

## 4.2. Fermentación Oscura

Se consideran tres problemas de optimización: (i) La minimización de la glucosa de salida, (ii) la maximización del  $H_2$  en fase líquida, (iii) la maximización del flujo de gas de  $H_2$ .

### 4.2.1. Funciones objetivos

Para los tres casos considerados, las funciones objetivo son los siguientes:

- Minimización de la glucosa de salida (4.8):

$$\text{mín } J = \left(1 - \frac{G_{in} - G}{G_{in}}\right)^2 \quad (4.8)$$

- Maximización del  $H_2$  en fase líquida (4.9):

$$\text{mín } J = -H_2 \quad (4.9)$$

- Maximización del flujo de hidrógeno (4.10):

$$\min J = -q_{H_2} = \frac{RT_{amb}V}{P_{amb} - P_{vap,H_2}} \frac{k_{LaH_2}}{M_{H_2}} (H_2 - M_{H,H_2} P_{H_2,gas}) \quad (4.10)$$

### 4.2.2. Restricciones

$$0 = -D(G_{in} - G) - \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DAc + 0,3238 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DPro + 0,0205 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - 0,0174 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DBut + 0,3028 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,2737 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DEt + 0,0242 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,0219 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DX + 0,0829 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - 0,1068 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X$$

$$0 = -DCO_2 + 0,0049 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X + 0,0087 \frac{\mu_{MAX2}G}{K_{S2} + G}X - k_{LaCO_2}(CO_2 - K_{H,CO_2}PCO_{2,gas})$$

$$0 = -DH_2 + 0,0351 \frac{\mu_{MAX1}G}{K_{S1} + G}X - k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}PH_{2,gas})$$

$$0 = -\frac{Q_{gas}}{V_{gas}}CO_{2,gas} + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaCO_2}(CO_2 - K_{H,CO_2}PCO_{2,gas})$$

$$0 = -\frac{Q_{gas}}{V_{gas}}H_{2,gas} + \frac{V}{V_{gas}}k_{LaH_2}(H_2 - M_{H_2}K_{H,H_2}PH_{2,gas})$$

$$(\text{Tratamiento m\u00ednimo}) 1,5 \leq Q \leq 4,5$$

$$G \leq 0,05G_{in}(\text{se consume el menos 95 \% de } G_{in})$$

Las restricciones corresponden a: (i) el cumplimiento de balances de materia en estado estacionario, (ii) l\u00edmites operativos en el flujo de alimentaci\u00f3n, y (iii) el consumo de al menos un 95 % de la glucosa de alimentaci\u00f3n.

Cuadro 4.2: Resultados de la optimización del modelo de fermentación obscura.

<b>Estado</b>	<b>Sim. Base</b>	<b>PO1</b>	<b>PO2</b>	<b>PO3</b>
G(g/L)	0.343	0.106	1.355	1.370
Ac(g/L)	2.76	2.842	2.574	2.572
Pro(g/L)	0.376	0.380	0.357	0.357
But(g/L)	5.7	5.768	5.414	5.41
Etanol(g/L)	0.4561	0.461	0.433	0.432
Biomasa(g/L)	1.833	1.86	1.735	1.734
CO <sub>2</sub> (g/L)	0.01039	0.02468	0.024	0.024
H <sub>2</sub> (g/L)	0.001336	0.00264	0.0031	0.0308
CO <sub>2</sub> g(g/L)	0.1468	0.03536	0.03433	0.0343
H <sub>2</sub> g(g/L)	0.483	0.1290	0.1310	0.1311
Q(L/h)	3	1.5	4.4915	4.5
qH <sub>2</sub> (L/d)	15	7.491	21.56	21.58

### 4.2.3. Resultados

Los resultados de los tres problemas de optimización se presentan en la Tabla 4.2.

Se puede observar que los problemas de optimización PO2 y PO3 conducen a resultados similares, asociados a operar en el valor máximo del flujo volumétrico de entrada. A diferencia del foto-fermentador, en este caso, para incrementar la producción de hidrógeno se requiere disminuir el tiempo de residencia. Esto se puede deber a que al aumentar el tiempo de residencia se favorece la formación de productos intermedios y no del hidrógeno. Debido a que el interés es la maximización del flujo de hidrógeno, para fines de control el problema de optimización PO3 es el que se selecciona.

# Capítulo 5

## Control de la Producción de Hidrógeno

En este Capítulo se presenta el planteamiento y el diseño del sistema de control para los casos de estudio. Primero se establece el objetivo del diseño del sistema de control. Posteriormente se presenta la identificación empírica para obtener un modelo simple entrada-salida. El diseño de control se formula utilizando la técnica de compensación de error de modelado descrita en el Capítulo 2. Finalmente se implementan en forma numérica el controlador propuesto y se compara con un controlador clásico PI sintonizado con reglas IMC.

### 5.1. Fotofermentación

#### 5.1.1. Planteamiento del problema

El problema de control de la foto-fermentación se puede establecer como la regulación del hidrógeno a la salida del reactor a un valor de 7200 mL, manipulando la dilución, como se muestra en la Figura (5-1).

Los elementos principales del problema de control son los siguientes:

1. Entrada de control: Velocidad de dilución,  $u(t) = D(t)$ .
2. Variable a controlar: hidrógeno de salida del reactor,  $y(t) = H_2(t)$ .
3. Perturbaciones posibles: (i) Carga orgánica de entrada,  $S_{in}(t)$ , (ii) cambios en la actividad de microorganismos, (iii) Disminución de la eficiencia de la luz.



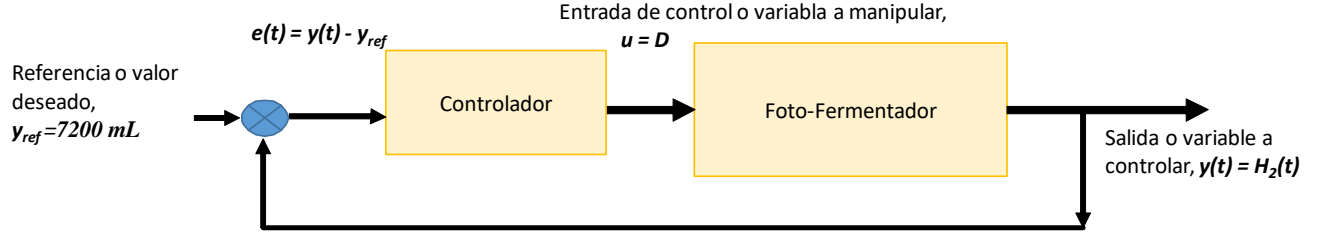


Figura 5-1: Configuración retroalimentada del problema de control de hidrógeno en el foto-fermentador.

Las consideraciones para el diseño del sistema de control son:

**A1** La entrada de control  $u$ , está acotada, i.e.

$$0,0 = u_{min} \leq u \leq u_{max} = 0,2 \quad (5.1)$$

**A2** La variable a controlar  $H_2(t)$ , se mide en forma continua.

**A3** El modelo que representa al proceso tiene incertidumbres.

### 5.1.2. Identificación Empírica

Para fines del diseño de control, es deseable establecer una relación simple entre la entrada de control  $u(t)$ , y la variable a controlar  $y(t)$ . Una forma simple de establecer esa relación es con el proceso de identificación empírica. La Figura (5-2) muestra la identificación empírica para el foto-fermentador, la cual se obtiene al aplicar un cambio escalón en  $u(t)$  y registrar la respuesta en  $y(t)$ .

Se puede observar que la respuesta de  $y(t)$  es de tipo primer orden, por lo cual se selecciona una función de transferencia de primer orden de la forma dada por la Ec. (5.2),

$$G_p(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_0 s + 1} \quad (5.2)$$

donde  $k_p$  es la ganancia del proceso en estado estacionario, y  $\tau_0$  es la constante de tiempo del proceso. Los parámetros del modelo de primer orden son:  $k_p = -84000$ ,  $\tau_0 = 30$ .

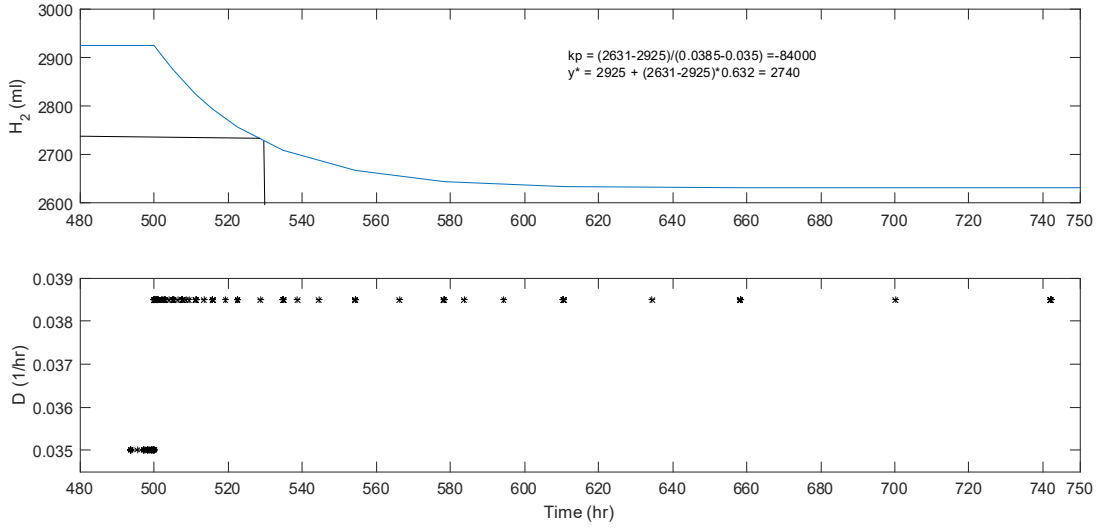


Figura 5-2: Identificación empírica del foto-fermentador.

### 5.1.3. Diseño del controlador

El diseño de control se basa en la técnica de compensación de error de modelado presentado en el Capítulo 2. Entonces, el procedimiento es como sigue:

1. Identificar y agrupar términos inciertos en un nuevo estado, denominado error de modelado,  $\eta(t)$ .
2. Estimar el nuevo estado con un observador simple dado por la Ec. (5.3),

$$\frac{d\tilde{\eta}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta(t) - \hat{\eta}(t)) \quad (5.3)$$

donde  $\tau_e$  es un parámetro de diseño del observador.

3. Introducir un controlador que cancele las incertidumbres y asigne la dinámica con control dada por la Ec. (5.4),

$$\frac{de(t)}{dt} = \tau_c^{-1}e(t) \quad (5.4)$$

donde  $e(t) = y(t) - y_{ref}$ , y  $\tau_c$  es un parámetro de diseño del controlador.

### 5.1.4. Diseño de control con base al modelo no-lineal del proceso

Al observar la dinámica del substrato en el modelo original, se puede identificar que existe una relación directa entre la  $u(t)$  y la derivada de  $y(t)$ , como se describe en la Ec. (5.5),

$$\frac{dy}{dt} = -uy + \frac{1}{Y_{\frac{X}{H}}} \phi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (5.5)$$

donde  $y(t) = H_2(t)$ ,  $u(t) = D(t)$ .

Al aplicar el control MEC se tiene lo siguiente:

1. Identificación del error de modelado o de los términos con incertidumbres, dados por la Ec. (5.6),

$$\eta(t) = \frac{1}{Y_{\frac{X}{H}}} \phi(I) \frac{\mu_{MAX} S}{K_S + S} X + \delta X \quad (5.6)$$

es decir, se considera que la cinética tipo Luedeking-Piret es la principal fuente de incertidumbres.

2. Se introduce el observador dado por (5.7) para estimar el error de modelado,

$$\frac{d\hat{\eta}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta(t) - \hat{\eta}(t)) \quad (5.7)$$

3. Después de algunas manipulaciones, el observador se puede escribir por las Ecs. (5.8-5.9),

$$\frac{dw(t)}{dt} = uy(t) - \hat{\eta}(t) \quad (5.8)$$

$$\hat{\eta}(t) = \tau_e^{-1}(w(t) + y(t)) \quad (5.9)$$

4. El modelo no-lineal con estimación de las incertidumbres esta dado por (5.10),

$$\frac{dy(t)}{dt} = -u(t)y(t) + \hat{\eta}(t) \quad (5.10)$$

5. Un controlador para alcanzar el objetivo de control esta dado por (5.11),

$$u(t) = \frac{1}{y(t)} \left( \hat{\eta}(t) + \tau_c^{-1}(y(t) - y_{ref}) + \frac{dy_{ref}}{dt} \right) \quad (5.11)$$

el cual garantiza que el error de regulación  $e(t)$  tiende a cero.

### 5.1.5. Diseño de control con base a un modelo lineal del proceso

Con la finalidad de diseñar un controlador con base a una relación simple entrada-salida, se parte de la función de transferencia del proceso, la cual es de primer orden y se expresa como (5.12),

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_0 s + 1} \quad (5.12)$$

Tomando la transformada de Laplace inversa se obtiene el modelo lineal de primer orden en el tiempo dado por (5.13),

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\tau_0^{-1}y(t) + k_p\tau_0^{-1}u(t) \quad (5.13)$$

donde  $u(t)$  es la dilución,  $y(t)$  es el substrato de salida a ser controlado.

1. Para considerar incertidumbres entre el modelo lineal y el proceso real, se introducen incertidumbres debidas a reducción del modelo original, perturbaciones y parámetros inciertos del modelo aproximado, y se obtiene la Ec. (5.14),

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\tau_0^{-1}y(t) + k_p\tau_0^{-1}u(t) + \eta(t) \quad (5.14)$$

2. Para estimar las incertidumbres se introduce el observador dado por la Ec. (5.15),

$$\frac{d\tilde{n}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta(t) - \tilde{n}(t)) \quad (5.15)$$

$\tau_e$  es un parámetro de diseño del observador.

3. El observador se puede escribir de acuerdo a las Ecs. (5.16-5.17),

$$\frac{dw(t)}{dt} = \tau_0^{-1}y(t) + k_p\tau_0^{-1}u(t) - \tilde{n}(t) \quad (5.16)$$

$$\tilde{n}(t) = \tau_e^{-1}(w(t) + y(t)) \quad (5.17)$$

La estimación de las incertidumbres proporciona robustez a un modelo simple.

4. Un controlador para alcanzar el objetivo de control esta dado por la Ec. (5.18),

$$u(t) = k_p^{-1} \tau_0 \left[ \tau_0^{-1} y(t) - \tau_c^{-1} e(t) - \tilde{n}(t) + \frac{dy_{ref}}{dt} \right] \quad (5.18)$$

### 5.1.6. Simulación a lazo cerrado

Los dos esquemas de control que se obtienen en la sección anterior, es decir, el control basado en el modelo del proceso y el control basado en el modelo aproximado de primer orden, se implementan en Matlab. El controlador se activa en en  $t = 300$  h y se considera la referencia óptima de  $H_2$  que se obtiene del problema de optimización, es decir  $y_{ref} = 7200$  mL. Para evaluar la capacidad del control al rechazo de perturbaciones, se aplica una perturbación con 20% más de  $S_{in}$  en  $t = 600$  h. Además, para cada caso, se compara el desempeño del controlador propuesto con un control PI sintonizado con reglas PID-IMC.

### Control basado en modelo no-lineal

Las Figuras (5-3) y (5-4) presenta el comportamiento a lazo cerrado para el diseño de control basado en el modelo no-lineal.

Se tienen los siguientes resultados:

- Con el control propuesto y el control PI se puede alcanzar la referencia deseada.
- Con el control propuesto y el control PI se logra minimizar el efecto de la perturbación que se aplica en la carga orgánica de entrada.
- El desempeño del control propuesto es mejor que el control PI debido a que la referencia se alcanza en forma más rápida y sin un sobredisparos en la variable a controlar.
- Para los dos controladores se alcanza inicialmente el valor mínimo de la dilución, pero el control PI se mantiene más tiempo en ese valor, degradando el comportamiento del proceso.
- Cuando se activa el controlador, la dilución baja al valor mínimo, incrementando el tiempo de residencia para aumentar el consumo del substrato por los microorganismos, y al mismo tiempo incrementar el hidrógeno que se produce.

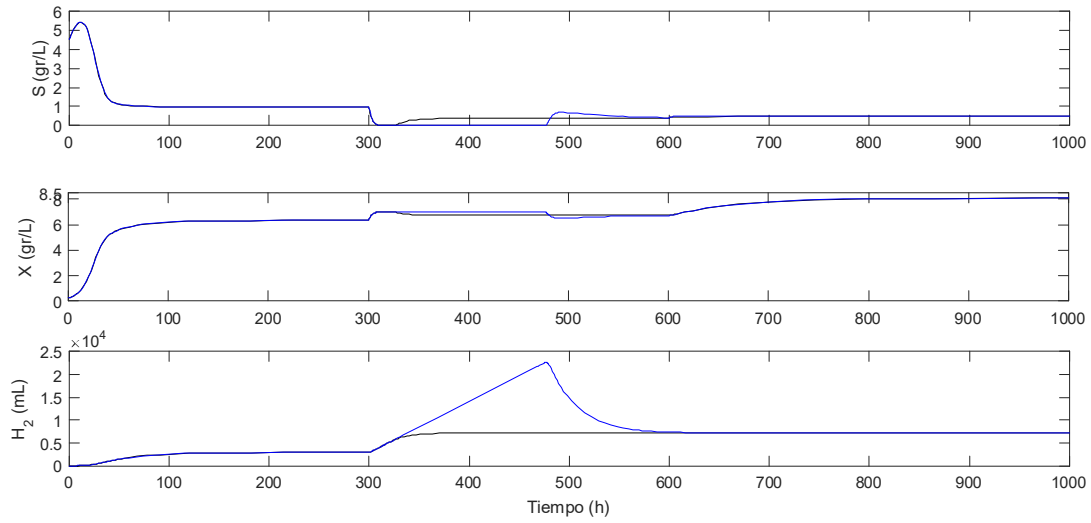


Figura 5-3: Desempeño del control basado en modelo no-lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico.

- Cuando se aplica la perturbación de una mayor carga orgánica en la corriente de entrada, la dilución se incrementa un poco para disminuir el tiempo de residencia y mantener la misma producción de hidrógeno.

## Control basado en modelo lineal

Las Figuras (5-5) y (5-6) presenta el comportamiento a lazo cerrado para el diseño de control basado en el modelo no-lineal.

Para el control propuesto basado en el modelo lineal, se pueden observar resultados idénticos al control basado en modelo no-lineal. De esta forma, se puede concluir que la aproximación de primer orden aumentada con la estimación de incertidumbres es una buena aproximación al modelo no-lineal.

## 5.2. Fermentación oscura

### 5.2.1. Planteamiento del problema

El problema de control se establece como se muestra en la Figura (5-7).

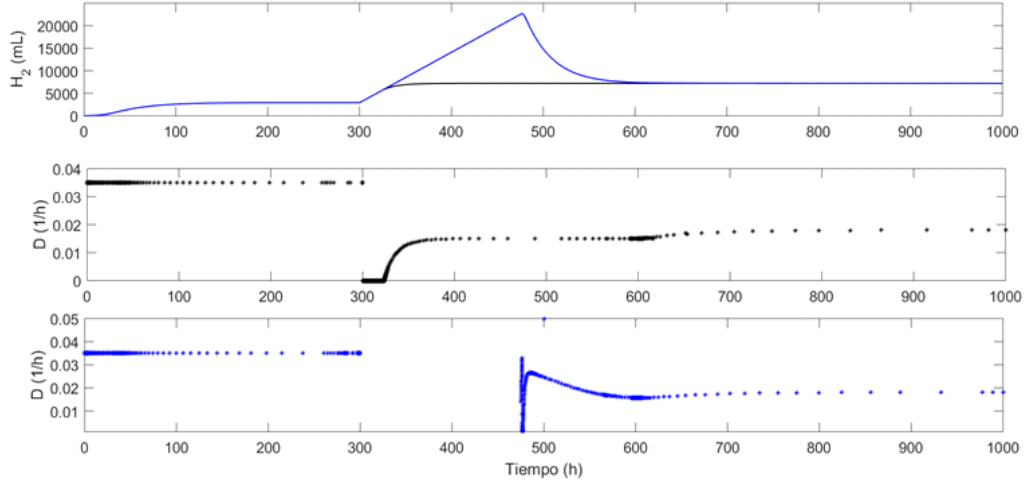


Figura 5-4: Producción de hidrógeno y entrada de control para el control basado en modelo no-lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico.

Donde,

- Objetivo del controlador: Regulación de  $y(t) = qH_2(t)$ , a una referencia deseada  $y_{ref} = 21,5$  L/d.
- Entrada de Control: Velocidad de dilución,  $u(t) = Q(t)$
- Perturbaciones posibles: (i) Carga orgánica de entrada,  $G_{in}(t)$ . (ii) Disminución de actividad de microorganismos.
- Consideraciones para el diseño del controlador:

A1. La entrada de control  $u$ , esta acotada, i.e.  $1,5 = u_{min} \leq u \leq u_{máx} = 4,5$

A2. La variable a controlar  $qH_2(t)$ , se mide en forma continua.

A3. El modelo que representa al proceso tiene incertidumbres.

### 5.2.2. Identificación Empírica

Para fines de diseño de control se requiere un modelo que relacione la entrada de control y la variable a controlar. Un modelo para tal fin se puede obtener de la respuesta escalón. La Figura

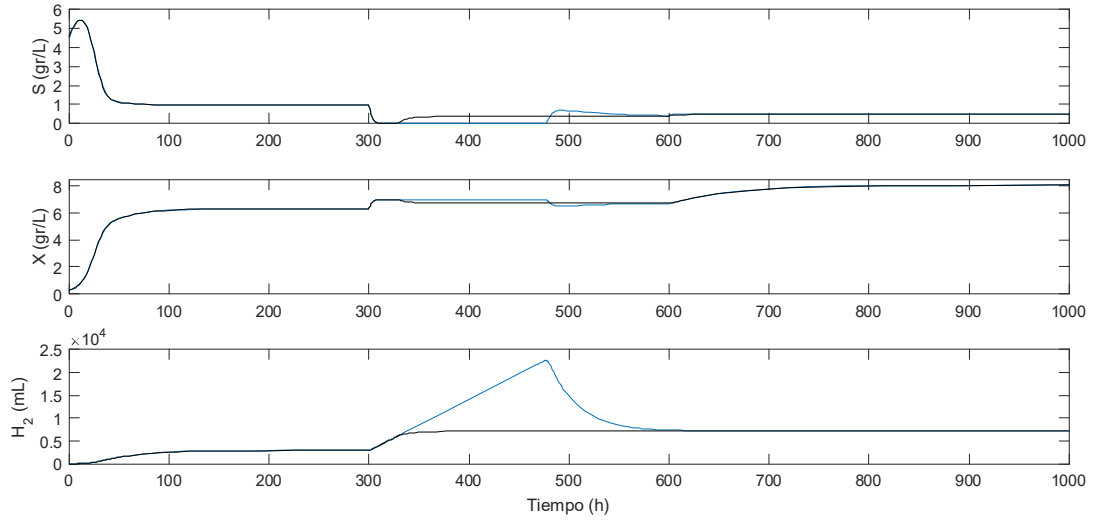


Figura 5-5: Desempeño del control basado en modelo lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico.

(5-8), muestra la respuesta al cambio escalón en la dilución y la respuesta en el flujo de hidrógeno.

Se puede notar que la respuesta es de primer orden, por lo tanto, se elige un modelo de esta clase. Los cálculos están dados por las Ecs. (5.19-5.21),

$$K_p = \frac{y_2 - y_1}{u_2 - u_1} = \frac{16,46 - 14,99}{3,33 - 3,0} = 4,86 \quad (5.19)$$

$$y^* = y_1 + (y_2 - y_1)0,632 = 15,91 \quad (5.20)$$

$$\tau(\text{en } y^*) = 5,013$$

$$\tau_0 = 0,013 \quad (5.21)$$

entonces, la función de transferencia esta dada por la Ec. (5.22),

$$G_p(s) = \frac{K_p}{\tau_0 s + 1} = \frac{4,86}{0,013s + 1} \quad (5.22)$$



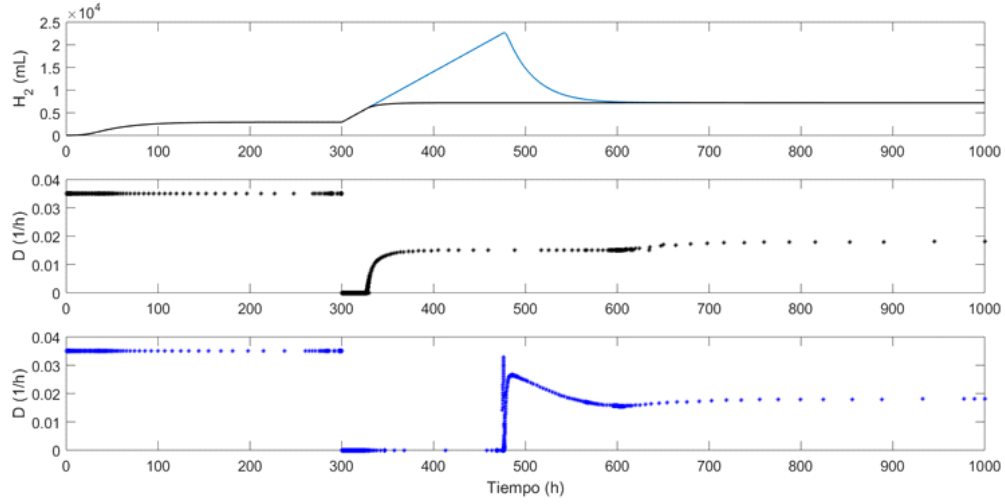


Figura 5-6: Producción de hidrógeno y entrada de control para el control basado en modelo lineal de foto-fermentación en el CSTR biológico.

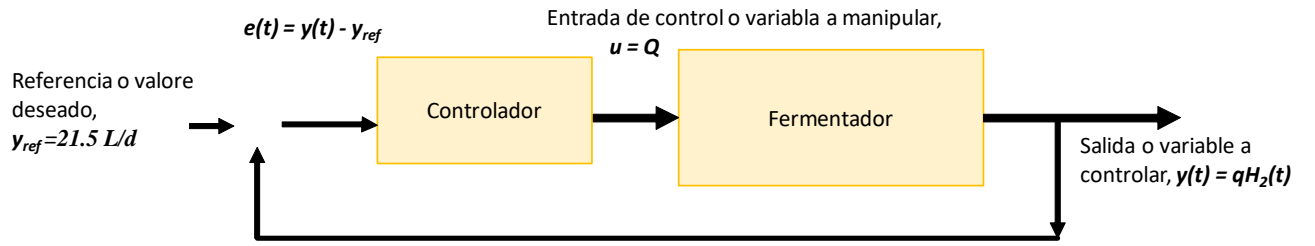


Figura 5-7: Problema de control del CSTR para fermentación oscura.

### 5.2.3. Diseño del controlador

El diseño de control por control se lleva a cabo por la técnica de compensación de error de modelado (MEC), la cual consiste en:

1. Se considera el modelo de primer orden aproximado en el tiempo dado por la Ec. (5.23),

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_0}y(t) + \frac{K_p}{\tau_0}u(t) \quad (5.23)$$

donde  $u(t)$  es la dilución,  $y(t)$  es el flujo de gas de hidrógeno, identificar y agrupar términos inciertos en un nuevo estado, denominado error de modelado. El modelo con incertidumbres

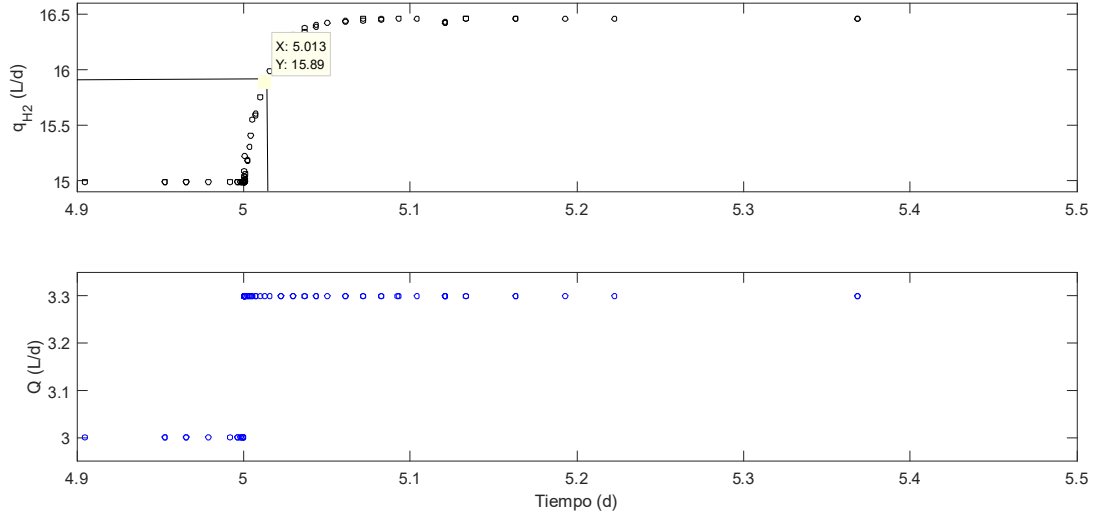


Figura 5-8: Identificación empírica del CSTR de producción de hidrógeno por fermentación oscura.

esta dado por la Ec. (5.24),

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_0}y(t) + \frac{K_p}{\tau_0}u(t) + \eta(t) \quad (5.24)$$

En este caso el término de incertidumbres esta asociado a la reducción del modelo original, perturbaciones y parámetros inciertos del modelo aproximado.

2. Estimar el nuevo estado con un observador simple dado por la Ec. (5.25),

$$\frac{d\tilde{n}(t)}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta(t) - \tilde{n}(t)) \quad (5.25)$$

$\tau_0$  es un parámetro de diseño del observador.

3. Introducir un controlador que cancele las incertidumbres y asigne la dinámica con control dada por la Ec. (5.26),

$$\frac{de(t)}{dt} = -\tau_c^{-1}e(t) \quad (5.26)$$

donde  $e(t) = y(t) - y_{ref}$ , y  $\tau_c$  es un parámetro de diseño del controlador.

4. El observador se puede escribir de la forma dada por las Ecs. (5.27-5.28),

$$\frac{dw(t)}{dt} = -\tau_0^{-1}y(t) + k_p\tau_0^{-1}u(t) + \tilde{n}(t) \quad (5.27)$$

$$\tilde{n}(t) = -\tau_e^{-1}(w(t) + y(t)) \quad (5.28)$$

La estimación de las incertidumbres proporciona robustez a un modelo simple.

5. Entonces, un controlador para alcanzar el objetivo de control esta dado por la Ec. (5.29),

$$u(t) = k_p^{-1}\tau_0 \left[ \tau_0^{-1}y(t) - \tau_c^{-1}e(t) - \tilde{n}(t) + \frac{dy_{ref}}{dt} \right] \quad (5.29)$$

Siguiendo las reglas de sintonizado propuestas por Alvarez-Ramírez (1999), la selección de parámetros del controlador está dada por:  $\tau_0 > \tau_c > \tau_e$

#### 5.2.4. Simulación a lazo cerrado

Las Figuras (5-9-5-11) muestran la implementación del esquema de control robusto basado en el modelo lineal y la comparación con un control PI sintonizado con reglas IMC. Los esquemas de control se implementan en  $t = 2$  dias. En el tiempo de  $t = 4$  dias se introduce una perturbación del 10 % en la carga orgánica de entrada.

Se tiene los siguientes resultados:

- El control propuesto permite alcanzar la referencia deseada y eliminar el efecto de la perturbación en la carga orgánica de entrada.
- El control PI no permite alcanzar la referencia deseada y eliminar el efecto de la perturbación en la carga orgánica de entrada debido a que se mantiene la variable a manipular en el valor máximo de la entrada de control.
- Cuando se activa el controlador, la dilución sube a un valor cercano al máximo posible, lo cual disminuye el tiempo de residencia. Se puede observar que los productos intermedios y la biomasa disminuyen su concentración respecto al valor de operación base, y la glucosa en el reactor y el flujo de hidrógeno se incrementan.

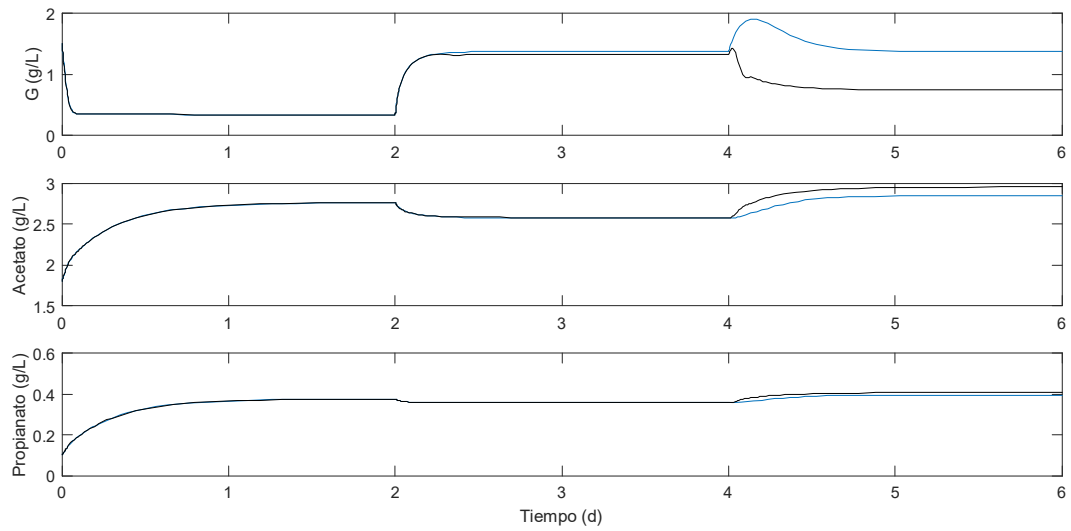


Figura 5-9: Comportamiento con control basado en modelo lineal para la Glucosa, Acetato, y Propionato en fermentación oscura.

- El incremento del flujo de hidrógeno esta asociado a un menor consumo de glucosa por los microorganismos no productores de hidrógeno, y por lo tanto menos generación de productos intermedios. Por otro lado, los microorganismos productores de hidrógeno si mantienen su consumo y aprovechan más la glucosa disponible en el medio para favorecer su crecimiento.

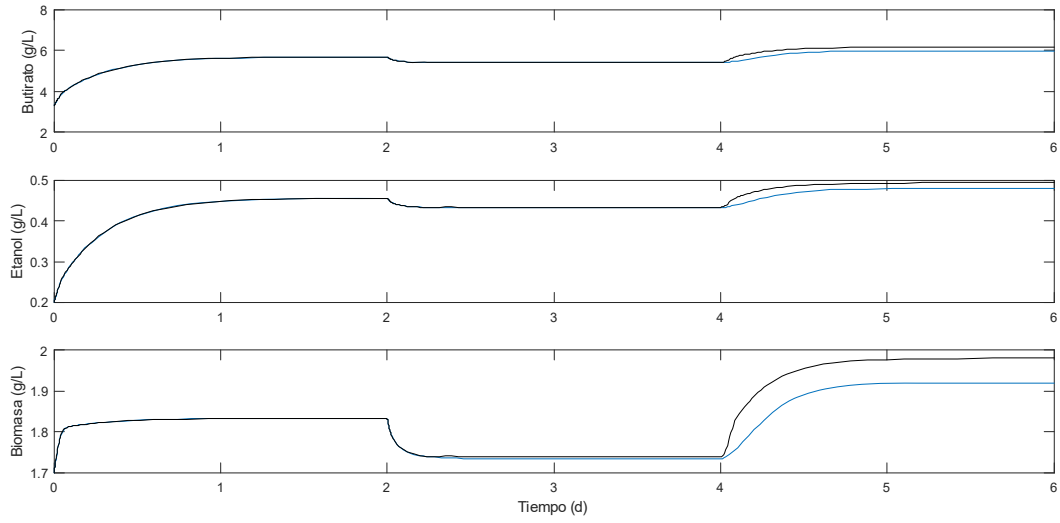


Figura 5-10: Comportamiento con control basado en modelo lineal para el Butirato, Etanol, y Biomasa en fermentación oscura.

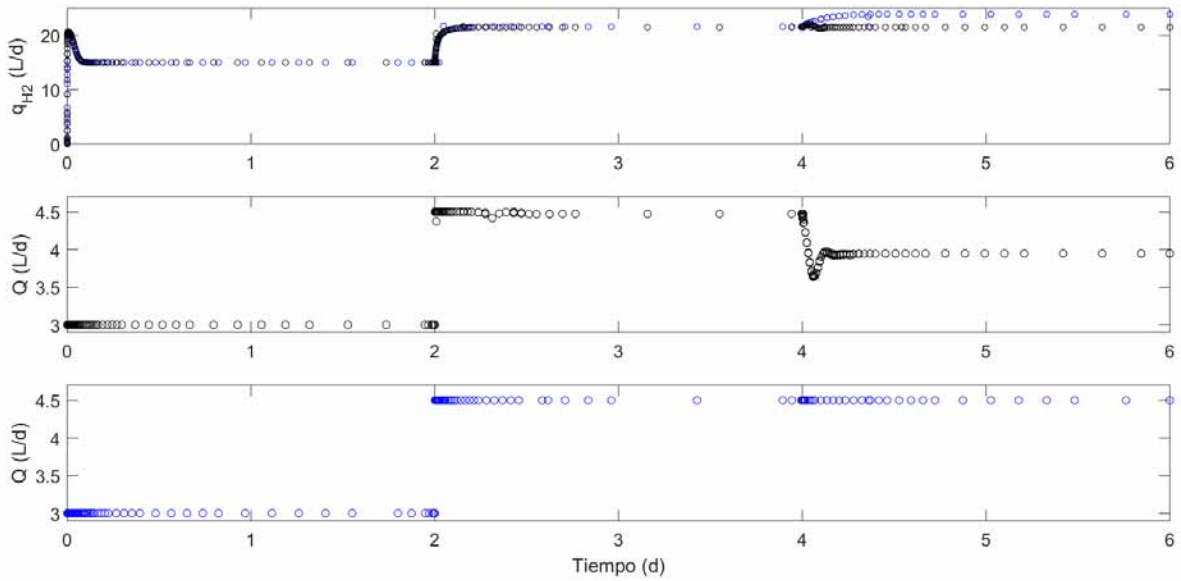


Figura 5-11: Control de  $q_{H_2}$  con control basado en modelo lineal y control PI para fermentación oscura en un CSTR.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En este Capítulo se resumen los resultados principales del trabajo de investigación que se llevó a cabo en los estudios de maestría y se identifica trabajo complementario que se puede llevar a cabo.

### 6.1. Resumen de la tesis

En esta tesis se aplicaron herramientas de optimización y control robusto de procesos para mejorar la producción de hidrógeno en procesos de producción continua en CSTR biológicos. Se estudiaron dos modelos reportados en literatura, uno de producción por foto-fermentación y el otro por fermentación oscura.

### 6.2. Resultados principales

- La operación de CSTR biológicos para producción de hidrógeno esta sujeta a la presencia de perturbaciones en la carga orgánica de entrada y cambios en la actividad de los microorganismos.
- Es posible incrementar la producción de hidrógeno en los dos casos de estudio a través de la formulación y solución de un problema de optimización.
- Es posible alcanzar y mantener la operación en el punto de referencia óptimo por medio del esquema de control propuesto a pesar de perturbaciones en la carga orgánica.

- El esquema de control propuesto presenta un mejor desempeño que el control clásico PI.
- El esquema de control propuesto es simple y con buenas propiedades de robustez.

## 6.3. Trabajo complementario

- Estudiar los elementos que se requieren para la implementación práctica de los esquemas de control propuestos.
- Aplicar otras técnicas de optimización en los casos de estudio.
- Aplicar otras técnicas de control en los casos de estudio.
- Extender los resultados de esta tesis a otros modelos de producción continua de hidrógeno en CSTR biológicos.

# Bibliografía

- [1] Abu-Rmileh, A., Garcia-Gabin, W., & Zambrano, D. (2010). Internal model sliding mode control approach for glucose regulation in type 1 diabetes. *Biomedical Signal Processing and Control*, 5(2), 94-102.
- [2] Aceves-Lara, C. A., Latrille, E., & Steyer, J. P. (2010). Optimal control of hydrogen production in a continuous anaerobic fermentation bioreactor. *International Journal of hydrogen energy*, 35(19), 10710-10718.
- [3] Alhumaizi, K., & Aris, R. (1994). Chaos in a simple two-phase reactor. *Chaos, Solitons & Fractals*, 4(11), 1985-2014.
- [4] Al Seadi, T., Rutz, D., Prassl, H., Köttner, M., Finsterwalder, T., Volk, S., & Janssen, R. (2008). *Biogas Handbook*.—University of Southern Denmark Esbjerg. ISBN 978-87-992962-0-0.
- [5] Alvarez, G. J., & Alvarez, G. J. (1988, June). Analysis and control of fermentation processes by optimal and geometric methods. In *American Control Conference*, 1988 (pp. 1112-1117). IEEE.
- [6] Alvarez-Ramirez, J., Morales, A., & Cervantes, I. (1998). Robust proportional- integral control. *Industrial & engineering chemistry research*, 37(12), 4740-4747.
- [7] Aguilar-López, R., Martínez-Guerra, R., Puebla, H., & Hernández-Suárez, R. (2010). High order sliding-mode dynamic control for chaotic intracellular calcium oscillations. *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 11 (1), 217-231.



- [8] Arimi, M. M., Knodel, J., Kiprop, A., Namango, S. S., Zhang, Y., & Geißen, S. U. (2015). Strategies for improvement of biohydrogen production from organic-rich wastewater: a review. *Biomass and bioenergy*, 75, 101-118.
- [9] Bailey, J.E., & Ollis, D.F. (1987). *Biochemical Engineering Fundamentals*. McGraw Hill, Inc., New York.
- [10] Bastidas-Oyanedel, J. R., Bonk, F., Thomsen, M. H., & Schmidt, J. E. (2015). Dark fermentation biorefinery in the present and future (bio) chemical industry. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 14(3), 473-498.
- [11] Bedoya, A., Castrillon, J. C., Ramirez, J. E., Vasquez, J. E., & Arias-Zavala, M. (2008). Producción biológica de hidrógeno: una aproximación al estado del arte. *Dyna*, 75 (154), 137-157.
- [12] Blanco Londoño, S. A., & Rodríguez Chaparro, T. (2012). Producción de biohidrógeno a partir de residuos mediante fermentación oscura: una revisión crítica (1993-2011). *Ingeniare. Revista Chilena de Ingeniería*, 20 (3), 398-411.
- [13] Boboescu, I. Z., Gherman, V. D., Lakatos, G., Pap, B., Bíró, T., & Maróti, G. (2016). Surpassing the current limitations of biohydrogen production systems: The case for a novel hybrid approach. *Bioresource Technology*, 204, 192-201.
- [14] Chi, J., & Yu, H. (2018). Water electrolysis based on renewable energy for hydrogen production. *Chinese Journal of Catalysis*, 39(3), 390-394.
- [15] Çelik, D., & Yıldız, M. (2017). Investigation of hydrogen production methods in accordance with green chemistry principles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(36), 23395-23401.
- [16] Chang, J. S., Lee, K. S., & Lin, P. J. (2002). Biohydrogen production with fixed-bed bioreactors. *International Journal of Hydrogen Energy*, 27(11-12), 1167-1174.
- [17] Chittibabu, G., Nath, K., & Das, D. (2006). Feasibility studies on the fermentative hydrogen production by recombinant *Escherichia coli* BL-21. *Process Biochemistry*, 41(3), 682-688.

- [18] Denbigh, K. G., & Turner, J. C. R. (1984). Chemical reactor theory: an introduction. Cambridge University Press., New York.
- [19] Demirbas, A. (2009). Biofuels. Springer-Verlag London Limited.
- [20] Demirbas, A. (2009). Progress and recent trends in biodiesel fuels. Energy Conversion and Management, 50 (1), 14-34.
- [21] Dincer, I., & Acar, C. (2015). Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability. International Journal of Hydrogen Energy, 40 (34), 11094-11111.
- [22] Doran, M.P., (1995). Bioprocess Engineering Principles. Academic Press Limited, San Diego, C.A.
- [23] Froment, G.F., & Bischoff, K.B., (1990). Chemical Reactor Analysis and Design. Second Edition, John Wiley and Sons.
- [24] Goodwin, J. A. S., Wase, D. A. J., & Forster, C. F. (1990). Anaerobic digestion of ice-cream wastewaters using the UASB process. Biological wastes, 32(2), 125-144.
- [25] Gonzalez, J., Fernandez, G., Aguilar, R., Barron, M., & Alvarez-Ramirez, J. (2001). Sliding mode observer-based control for a class of bioreactors. Chemical Engineering Journal, 83(1), 25-32.
- [26] Hillmer, P., & Gest, H. (1977). H<sub>2</sub> metabolism in the photosynthetic bacterium *Rhodospseudomonas capsulata*: H<sub>2</sub> production by growing cultures. Journal of Bacteriology, 129(2), 724-731.
- [27] Hippe, H., Caspari, D., Fiebig, K., & Gottschalk, G. (1979). Utilization of trimethylamine and other N-methyl compounds for growth and methane formation by *Methanosarcina barkeri*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 76(1), 494-498.
- [28] Holladay, J. D., Hu, J., King, D. L., & Wang, Y. (2009). An overview of hydrogen production technologies. Catalysis Today, 139 (4), 244-260.
- [29] Huser, B. A., Wuhrmann, K., & Zehnder, A. J. (1982). *Methanothrix soehngenii* gen. nov. sp. nov., a new acetotrophic non-hydrogen-oxidizing methane bacterium. Archives of Microbiology, 132(1), 1-9.

- [30] Kalinci, Y., Hepbasli, A., & Dincer, I. (2009). Biomass-based hydrogen production: a review and analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(21), 8799-8817.
- [31] Kumar, G., Sivagurunathan, P., Sen, B., Mudhoo, A., Davila-Vazquez, G., Wang, G., & Kim, S. H. (2017). Research and development perspectives of lignocellulose-based biohydrogen production. *International Biodeterioration & Biodegradation*, 119, 225-238.
- [32] Levin, D.B., Pitt, L., & Love, M. (2004). Biohydrogen production: prospects and limitations to practical application. *International Journal of Hydrogen Energy*, 29 (2), 173-185.
- [33] Łukajtis, R., Hołowacz, I., Kucharska, K., Glinka, M., Rybarczyk, P., Przyjazny, A., & Kamiński, M. (2018). Hydrogen production from biomass using dark fermentation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 91, 665-694.
- [34] Manish, S., & Banerjee, R. (2008). Comparison of biohydrogen production processes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(1), 279-286.
- [35] Marcos, N. I., Guay, M., Dochain, D., & Zhang, T. (2004). Adaptive extremum-seeking control of a continuous stirred tank bioreactor with Haldane's Kinetics. *Journal of Process Control*, 14(3), 317-328.
- [36] Méndez-Acosta, H. O., Palacios-Ruiz, B., Alcaraz-González, V., Steyer, J. P., González-Álvarez, V., & Latrille, E. (2008). Robust control of volatile fatty acids in anaerobic digestion processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(20), 7715-7720.
- [37] Nath, K., & Das, D. (2011). Modeling and optimization of fermentative hydrogen production. *Bioresource Technology*, 102(18), 8569-8581.
- [38] Neria-González, M. I., Martínez-Guerra, R., & Aguilar-López, R. (2008). Feedback regulation of an industrial aerobic wastewater plant. *Chemical Engineering Journal*, 139(3), 475-481.
- [39] Ogunnaike, B. A., & Ray, W. H. (1994). *Process dynamics, modeling, and control* (Vol. 1). New York: Oxford University Press.
- [40] Ortiz, J.R. (2005). *Robustez en controladores retroalimentados*. Instituto Tecnológico de Celaya.

- [41] Ozkan, L., Erguder, T. H., & Demirer, G. N. (2009). Dark Fermentative Bio-hydrogen Production from sugar-beet processing wastes. na.
- [42] Pérez, P.A.L., Neria-González, M.I., & López, R.A. (2015). Increasing the bio-hydrogen production in a continuous bioreactor via nonlinear feedback controller. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40 (48), 17224-17230.
- [43] Piemonte, V., Di Paola, L., Chakraborty, S., & Basile, A. (2014). Sequencing batch reactors (SBRs) for BioH<sub>2</sub> production: reactor operation criteria. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39 (10), 4863-4869.
- [44] Puebla, H. (2010). Simulación y control de procesos, UAM-Azcapotzalco.
- [45] Puebla, H., Hernandez-Martinez, E., Hernandez-Suarez, R., Ramirez-Muñoz, J., & Alvarez-Ramirez, J. (2013). A simple feedback control approach for output modulation of spatiotemporal patterns in a class of tubular reactors. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(49), 17517-17528.
- [46] Riffat, R. (2013). *Fundamentals of wastewater treatment and engineering*. Londres: IWA Publishing, CRC Press.
- [47] Selişteanu, D., Petre, E., & Răşvan, V. B. (2007). Sliding mode and adaptive sliding-mode control of a class of nonlinear bioprocesses. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 21(8-9), 795-822.
- [48] Shtessel, Y., Edwards, C., Fridman, L. and Levant, A. (2014). *Sliding mode control and observation*, Birkhäuser.
- [49] Singh, L., & Wahid, Z. A. (2015). Methods for enhancing bio-hydrogen production from biological process: a review. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 21, 70-80.
- [50] Torres Quintanilla, E. (2017). Control robusto de un reactor continuo para la producción de biobutanol, UAM-Azcapotzalco.
- [51] Velasco-Pérez, A., Puebla, H., Martinez-Delgadillo, S., Morales, M. A., & Solar-González, R. (2014). Regulación de aguas residuales petroquímicas en un sistema de lodos activados

vía una propuesta simple de control retroalimentado robusto. *Revista mexicana de ingeniería química*, 13(3), 919-931.

- [52] Velázquez-Sánchez, H. I., Puebla, H., & Aguilar-López, R. (2016). Novel Feedback Control to Improve Biohydrogen Production by *Desulfovibrio alaskensis*. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 14(6), 1255-1264.
- [53] da Silva Veras, T., Mozer, T. S., & da Silva César, A. (2017). Hydrogen: trends, production and characterization of the main process worldwide. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(4), 2018-2033.
- [54] Voldsund, M., Jordal, K., & Anantharaman, R. (2016). Hydrogen production with CO<sub>2</sub> capture. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(9), 4969-4992.
- [55] Zúñiga, I. T., Vargas, A., Latrille, E., & Buitrón, G. (2015). Robust observation strategy to estimate the substrate concentration in the influent of a fermentative bioreactor for hydrogen production. *Chemical Engineering Science*, 129, 126-134.
- [56] Zhang, M., Yue, T., Ali, S., Selic, B., Okariz, O., Norgre, R., & Intxausti, K. (2018). Specifying uncertainty in use case models. *Journal of Systems and Software*, 144, 573-603.

# Apéndice A

## Material Complementario

### A.1. Programas para la simulación numérica sin control de los casos de estudio

En las Figuras (A-1-A-3) se muestra el código en Matlab de las simulación numérica base para el primer caso de estudio.

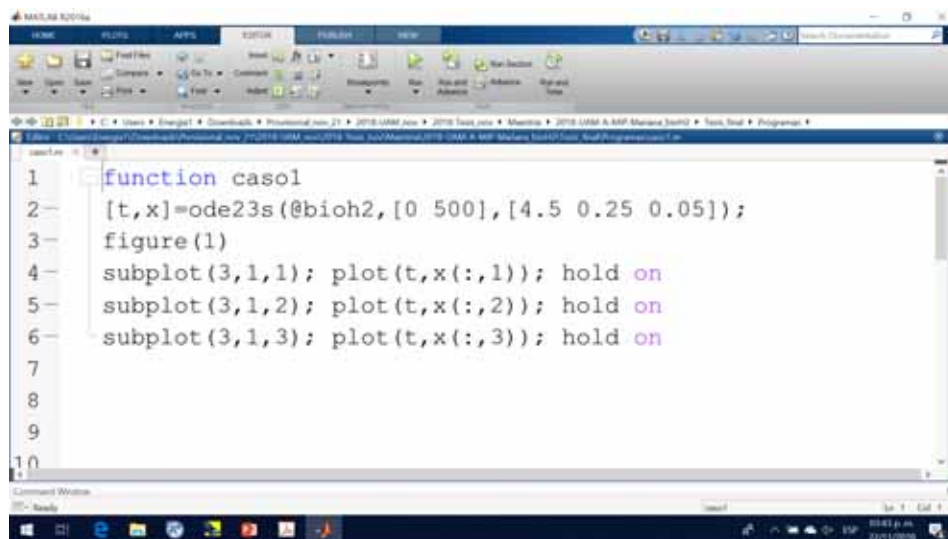


Figura A-1: Simulación numérica del caso de estudio 1: Subrutina principal.

En las Figuras (A-4-A-6) se muestra el código en Matlab de las simulación numérica base para el segundo caso de estudio.

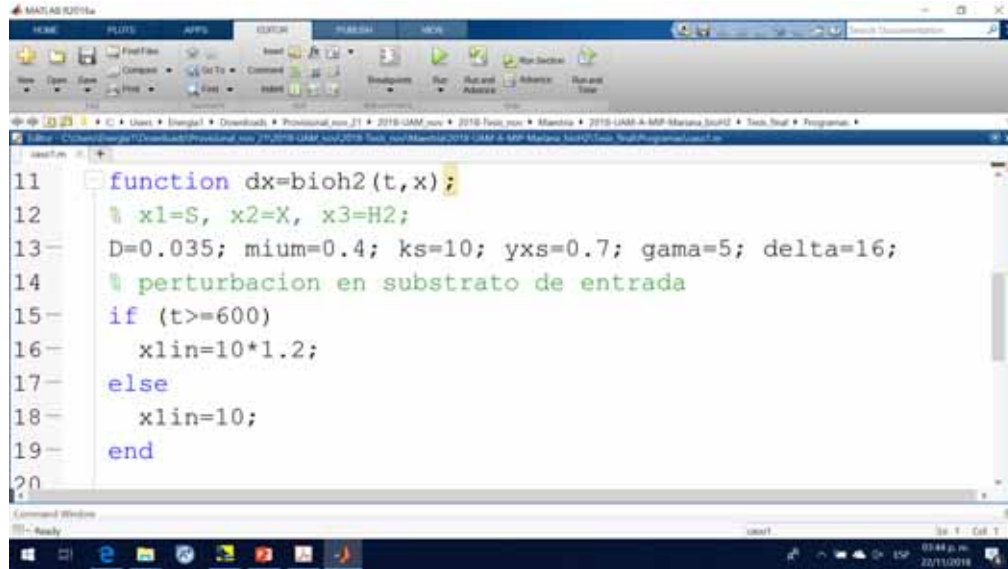


Figura A-2: Simulación numérica del caso de estudio 1: Parámetros.

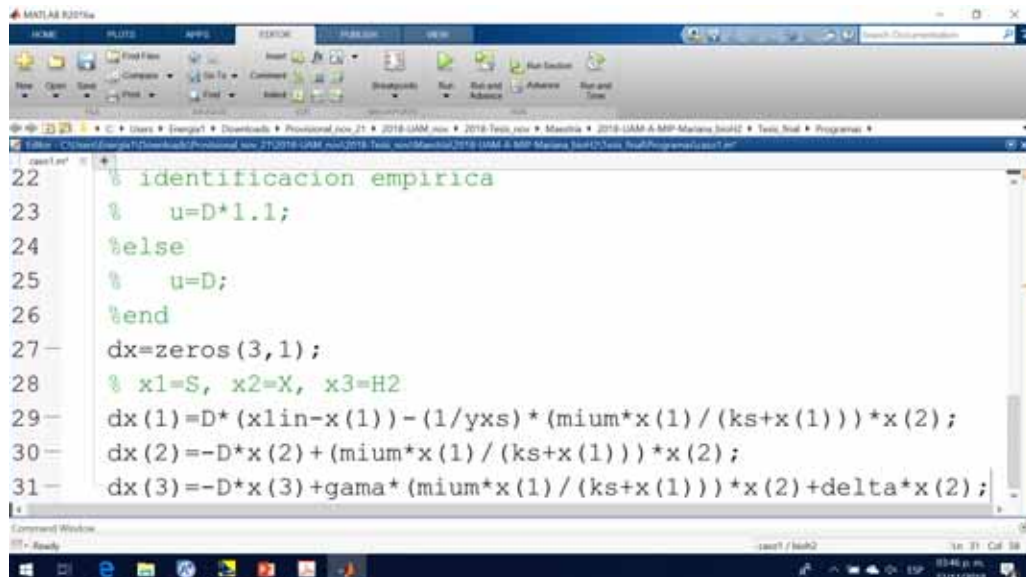


Figura A-3: Simulación numérica del caso de estudio 1: Modelo.

```

1 function caso2
2 % x1=glucosa, x2=acetato, x3=propionato, x4=butirato
3 % x5=etanol, x6=biomasa, x7=CO2, x8=H2, % x9=CO2g, x10=H2g
4 [t,x]=ode15s(@cstrbio,[0 6],[1.5 1.8 0.1 3.3 0.2 1.7 0 0 0 0]);
5 figure(1)
6 figure(2)
7 subplot(3,1,1); plot(t,x(:,1)); hold on
8 subplot(3,1,2); plot(t,x(:,2)); hold on
9 subplot(3,1,3); plot(t,x(:,3)); hold on
10 figure(3)
11 subplot(3,1,1); plot(t,x(:,4)); hold on
12 subplot(3,1,2); plot(t,x(:,5)); hold on
13 subplot(3,1,3); plot(t,x(:,6)); hold on
14 figure(4)
15 subplot(4,1,1); plot(t,x(:,7));
16 subplot(4,1,2); plot(t,x(:,8));
17 subplot(4,1,3); plot(t,x(:,9));
18 subplot(4,1,4); plot(t,x(:,10));

```

Figura A-4: Simulación numérica del caso de estudio 2: Subrutina principal.

```

20 function dx=cstrbio(t,x)
21 dx=zeros(10,1);
22 % x1=glucosa, x2=acetato, x3=propionato, x4=butirato
23 % x5=etanol, x6=biomasa, x7=CO2, x8=H2,
24 % x9=CO2g, x10=H2g
25 mm1=37.3197; mm2=27.2416; kg1=0.2896; kg2=0.2596;
26 R=8.314e-2; V=0.9; Vgas=0.35; Patm=1.013; pvaph2=0.0557;
27 Mh2=2.01588; Treac=308; Tamb=298; Q=3; xlin=20; D=Q/V;
28 klaco2=2000; klah2=3065; Khco2=0.0271; Khh2=7.38e-4;
29 pco2=x(9)*R*Treac;
30 ph2=(x(10)*R*Treac)/Mh2;
31 rhoco2=klaco2*(x(7)-Khco2*pco2);
32 rhoh2=klah2*(x(8)-Mh2*Khh2*ph2);
33 r1=(mm1*x(1)*x(6))/(kg1+x(1));
34 r2=(mm2*x(1)*x(6))/(kg2+x(1));
35 qco2=((R*Tamb*V)/(Patm-pvaph2))*(rhoco2);
36 qh2=((R*Tamb*V)/(Patm-pvaph2))*(rhoh2/Mh2);
37 Qgas=qco2+qh2;

```

Figura A-5: Simulación numérica del caso de estudio 2: Parámetros.



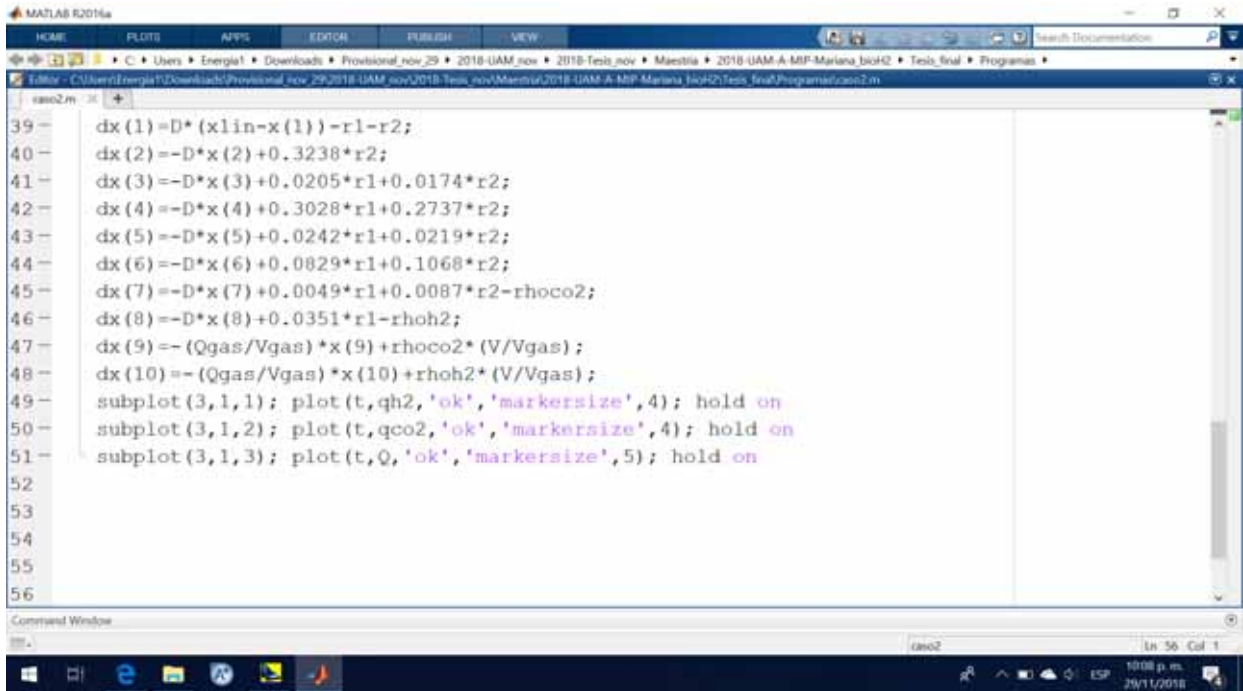


Figura A-6: Simulación numérica del caso de estudio 2: Modelo.

## A.2. Sintonizado de los controladores PI con IMC

El sintonizado de los controladores PI con IMC esta dado por la Ec (A.1).

$$\begin{aligned}
 k_c &= \frac{1}{k_p} \frac{\tau_0}{\tau_c + \tau_d} \\
 \tau_i &= \min \{ \tau_0, 4(\tau_c + \tau_d) \}
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

donde  $\tau_c$  es una constante de tiempo con control que se puede elegir arbitrariamente.

Los valores de los dos casos de estudio son los siguientes:

1. Foto-fermentación:

$$\begin{aligned}
 k_p &= -84000 \\
 \tau_0 &= 30 \\
 \tau_d &= 0 \\
 \tau_c &= [1 - 15]
 \end{aligned}$$

## 2. Fermentación oscura:

$$k_p = 4,9$$

$$\tau_0 = 0,013$$

$$\tau_d = 0$$

$$\tau_c = [0,001 - 0,01]$$

## A.3. Trabajos derivados de la tesis

Los siguientes trabajos se generaron como parte de los resultados de la tesis:

1. Rodriguez-Jara, M., Piceno-Diaz, E.R., Vian-Perez, J.G., Gutierrez-Limon, M.A., Puebla, H. (2018). Improving the Biohydrogen Production in a CSTR via Dark Fermentation using Advanced Controllers, Energy Journal. Sometido.
2. Rodriguez-Jara, M., Piceno-Diaz, E.R., Flores-Mejia, H., Puebla, H. (2018). Increasing the BioH<sub>2</sub> production in a CSTR via dark fermentation using steady-state optimization and robust controllers, Proc. 11th International Conference on Sustainable Energy & Environmental Protection, Vol. 2, pp.176-181.
3. Rodríguez-Jara, M., Piceno Diaz, E., González-Brambila, M.M., Puebla,H., Hernández-Martínez, E., Velasco-Pérez, A. (2017). Co-existence of Microbial Ecology in a Chemostat using a Robust Feedback. In 10th International Symposium on Biomathematics and Ecology Education and Research, Normal, Illinois, USA October 6-8, 2017.
4. Rodriguez-Jara, M., Aguilar-Lopez, R., Puebla, H.(2017). Optimización y Control Robusto de un Reactor Continuo de Producción de Biohidrogeno. Congreso Internacional de Energía 2017, Ciudad de México, México.